TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN

DISSERTATION

Entwicklung und Validierung potenzieller Prüfmethoden zur Selbstzündungscharakterisierung von Ottokraftstoffen

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der technischen Wissenschaften unter der Leitung von

Univ. Prof. Dr. techn. Dipl.-Ing. Bernhard Geringer

und

Univ. Prof. Dr.-Ing. Stefan Pischinger

eingereicht an der Technischen Universität Wien

Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

Dipl.-Ing. Jörg Dedl

0628097

Fliegenstraße 2

80337 München

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Eidesstattliche Erklärung

Ich habe zur Kenntnis genommen, dass ich zur Drucklegung meiner Arbeit unter der Bezeichnung

„Entwicklung und Validierung potenzieller Prüfmethoden zur Selbstzündungscharakterisierung von Ottokraftstoffen“

nur mit Bewilligung der Prüfungskommission berechtigt bin. Ich erkläre weiter an Eides statt, dass ich meine Dissertation nach den anerkannten Grundsätzen für wissenschaftliche Arbeiten selbstständig ausgeführt habe und alle verwendeten Hilfsmittel, insbesondere die zugrunde gelegte Literatur genannt habe.

Weiter erkläre ich dieses Dissertationsthema bisher weder im In- noch im Ausland (einer Beurteilerin/ einem Beurteiler zur Begutachtung) in irgendeiner Form als Prüfungsarbeit vorgelegt habe und dass diese Arbeit mit der vom Begutachter beurteilten Arbeit übereinstimmt.

München, am ……

Dipl.-Ing. Jörg Dedl

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Danksagung

An dieser Stelle sei all denjenigen gedankt, welche mich bei der Anfertigung meiner Dissertation stets unterstützt und motiviert haben.

Mein herzlicher Dank gebührt Herrn Prof. Dr. techn. Dipl.-Ing. Bernhard Geringer, Leiter des Instituts für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik der Technischen Universität Wien, für seine bemühte Unterstützung und Betreuung sowie sein entgegengebrachtes Vertrauen während meiner Zeit als Universitätsassistent und darüber hinaus.

Des Weiteren bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefan Pischinger, Leiter des Lehrstuhls für Verbrennungskraftmaschinen der RWTH Aachen University, für die Begutachtung meiner Dissertation.

Besonderer Dank gilt meiner Familie, welche mich stets unterstützte und mir diese wertvolle Ausbildung ermöglichte.

Von ganzem Herzen danke ich meiner Freundin Elisabeth Strunz für das entgegengebrachte Verständnis und ihrer Geduld hinsichtlich vieler verpasster gemeinsamer Stunden.

Abschließend möchte ich mich vielmals bei Herrn Dipl.-Ing. Klaus Strunz für seine überaus engagierte Unterstützung bedanken.

München, Juli 2019 Dipl.-Ing. Jörg Dedl

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Kurzfassung

Die hohe Leistungsdichte moderner direkteinspritzender Ottomotoren begünstigt das Auftreten irregulärer Verbrennungsphänomene hohen Schadenspotenzials (Klopfen, Vorentflammung, Glühzündung). Neben motorischer Maßnahmen zur Reduktion deren Auftretenswahrscheinlichkeit, hat ebenfalls der Kraftstoff einen maßgebenden Einfluss auf die Selbstzündungsneigung im Motor. Die normkonforme Research-Oktanzahl (ROZ) bzw. die Motor-Oktanzahl (MOZ) lassen in diesem Zusammenhang keine ausreichend belastbare Bewertung der Selbstzündungscharakteristik zu.

Mit dem Ziel der korrekten Selbstzündungsbewertung von alkoholhaltigen Ottokraftstoffen wurden in Martin (2013) [1] neue Kraftstoffbewertungsmethoden zur Charakterisierung des Klopf- (Direkteinspritzende Oktanzahl, DOZ), des Vorentflammungs- (Compressed Pre-Ignition Kennzahl, CPI) und des Glühzündungsverhaltens (Hot-Spot Pre-Ignition Kennzahl) vorgestellt. Die Bewertung und Adaption bzw. Optimierung der Prüfmethoden für marktkonforme Benzine ist Gegenstand der vorliegenden Dissertation.

Auf Basis einer Kraftstoffauswahl von mehr als 30 Proben wird die Validierung der potenziellen Kennzahlen an einem modernen Dreizylinder-Serienaggregat bzw. einem Einzylinder-Forschungsmotor durchgeführt. Die Kennzahlermittlung selbst basiert auf einem gemäß Martin (2013) [1] adaptierten direkteinspritzenden Coorperative-Fuel-Research-Prüfmotor (CFR-Motor) und wird von umfangreichen thermodynamischen Analysen begleitet.

Die Ergebnisse der Methodenvalidierung lassen eine deutliche Diskrepanz der kraftstoffspezifischen Selbstzündungsneigung am CFR-Aggregat gegenüber modernen Versuchsträgern erkennen. Die thermodynamische Analyse der Aggregate, gestützt von reaktionskinetischen Daten der Kraftstoffe, identifiziert die In-Zylinder-Größen Druck und Temperatur als maßgebende Parameter der motorischen Selbstzündungsneigung.

Die Adaption des direkteinspritzenden CFR-Motors mittels einer externen Aufladeeinheit inklusive Ladeluftkühlung sowie der Berücksichtigung des kraftstoffspezifischen Verdampfungsverhaltens resultieren in einer signifikanten Verbesserung der Belastbarkeit der Kraftstoffcharakterisierung. Mit einer Genauigkeit von mehr als 90 % zeigt insbesondere die CPI und DOZ ein überaus gutes Ergebnis.

Hinsichtlich des in [1] vorgestellten Verfahrens zur Glühzündungsbewertung (HSPI) auf Basis des modifizierten CFR-Motors ist keine zufriedenstellende Anwendbarkeit auf moderne Brennverfahren gegeben und macht weiteren Forschungsbedarf notwendig.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Abstract

The high risk of abnormal combustion phenomenon (knocking, pre-ignition) can be associated to the high power density of modern direct-injection gasoline engines. There are two possibilities to reduce this risk by either changing the engine settings or influencing it by fuel properties. In this context neither the Research-Octane-Number (RON) nor the Motor-Octane-Number can be used for reliable validation of self-ignition characteristics in modern engines.

First investigations of new characteristic numbers to describe the self-ignition behaviour of alcoholic fuels were already done and described in Martin (2013) [1]. Within this publication the Direct-Injection-Octane-Number (DON), the Compressed Pre-Ignition-Number (CPI) and the Hot-Spot-Pre-Ignition-Number (HSPI) were presented. The assessment and optimization of these new test methods on common gasoline fuels is shown within this present dissertation.

The validation of the characteristic numbers is based on 30 different fuels and performed on a modern three-cylinder-production-engine and a one-cylinder-research-engine. The characteristic numbers are determined on a direct-injection Cooperative-Fuel-Research-Engine (CFR-Engine) as described in Martin (2013). Additionally various thermodynamic analysis were conducted.

The results show a significant variation between a fuel‘s self-ignition behaviour in the CFR-Engine compared to modern engines. Based on thermodynamic analysis and reaction kinetic data of the fuels, temperature and pressure are identified as main parameters influencing the self-ignition characteristics.

In a further step the engine was adapted with a supercharger and an additional intercooler in order to simulate modern engine conditions. These actions as well as the consideration of a fuel’s vaporization properties lead to a significant improvement of the characteristic numbers. Especially the DON and the CPI show a coefficient of determination higher than 90 %.

By now it was not possible to get satisfying results for the HSPI-Number on the modified CFR-engine. Therefore further research has to be done.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Abkürzungsverzeichnis

A	präexponentieller Faktor	
AKI	Anti Knock Index (ROZ * MOZ / 2)	
b_0	Niveauparameter	
b_1	Steigungsparameter	
BD	Brenndauer	[°KW]
BP	Betriebspunkt	
BV	Brennverzug	[°KW]
C	Kohlenstoff	
CO_2	Kohlenstoffdioxid	
C_nH_{2n+1}	Alkyl-Gruppe	
CFR	Cooperative-Fuel-Research	
CPI	Compression Pre-Ignition	
DCR	Digital Counter Reading	
DD	Dampfdruck	[bar]
DE	Direkteinspritzung	
DOZ	Direkteinspritzende-Oktanzahl	
E_a	Aktivierungsenergie	[J/kmol]
ETBE	Ethyl-Tertiär-Buthyl-Ether	
FID	Flammenionisationsdetektor	
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschine	
GST	Glühstifttemperatur	[°C]
H	Wasserstoff	
H_2O	Wasser	
$H\dot{O}_2$	Hydroperoxyl-Radikal	
HSPI	Hot Spot Pre-Ignition	
IFA	Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik, TU Wien	
KA	Klopfamplitude	[bar]
KG	Klopfgrenze	
KW	Kurbelwinkel	
LSPI	Low-Speed Pre-Ignition	
MB	Match Blend	

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

MFB05%	Zeitpunkt 5 % Gemischumsatz (Brennbeginn)	[°KW]
$MFB05\%_{VE}$	Brennbeginngrenze zur Vorentflammungsdetektion	[°KW]
MFB50%	Zeitpunkt 50 % Gemischumsatz (Verbrennungsschwerpunkt)	[°KW]
MFB90%	Zeitpunkt 90 % Gemischumsatz (Verbrennungsende)	[°KW]
MOZ	Motor-Oktanzahl	
MTBE	Methyl-Tertiär-Buthyl-Ether	
NTK	Niedertemperaturkoeffizient	
O	Sauerstoffatom	
O_2	Sauerstoff	
OI	Oktanindex	
ȮH	Hydroxid-Radikal	
p	Druck	[bar]
$p_{max, VE}$	Spitzendruckgrenze zur Vorentflammungsdetektion	[bar]
PCFC	Juniorprofessur für physikalisch-Chemische Grundlagen der Verbrennung, RWTH Aachen	
PRF	Primary Reference Fuel	
R^2	Bestimmtheitsmaß	
R, Ṙ	Radikal	
RCM	Rapid Compression Machine	
R_m	allgemeine Gaskonstante	[J/kmolK]
ROZ	Research-Oktanzahl	
RWTH	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule, Aachen	
S	Sensitivität (ROZ – MOZ)	
SB	Splash Blend	
SE	Siedeende	[°C]
T	Temperatur	[°C]
ZZP	Zündzeitpunkt	[°KW]

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

U_i	Störgröße	
VE	Vorentflammung	
VKA	Lehrstuhl für Verbrennungskraft-maschinen, RWTH Aachen	
x_i	Einflussgröße (unabhängige Größe)	
$\bar{x}$	Mittel der Einflussgröße	
y_i	Zielgröße (abhängige Größe)	
$\bar{y}$	Mittel der Zielgröße	
$\hat{y}_i$	geschätzte Regressionswerte	
WWFC	World Wide Fuel Charter	
$\Delta_R H$	Reaktionsenthalpie	[J/mol]
β_0, β_1	unbekannte skalare Parameter	
ε	geometrisches Verdichtungsverhältnis	
λ	Luft-Kraftstoff-Verhältnis	
$\mu_{MFB05\%}$	Mittelwert des Brennbeginns	[°KW]
$\sigma_{MFB05\%}$	Standardabweichung des Brennbeginns	[°KW]

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Inhaltsverzeichnis

Danksagung I

Kurzfassung II

Abstract III

Abkürzungsverzeichnis IV

Inhaltsverzeichnis VII

1 Einleitung 1

1.1 Motivation 1

1.2 Zielsetzung 2

2 Grundlagen 4

2.1 Selbstzündungsphänomene im Ottomotor 4

2.1.1 Klopfende Verbrennung 4

2.1.2 Vorentflammung 8

2.1.3 Glühzündung 11

2.2 Kraftstoffe im ottomotorischen Einsatz 12

2.2.1 Aufbau und Zusammensetzung 13

2.2.2 Charakterisierung von Ottokraftstoffen 20

2.3 Reaktionskinetik der Kohlenwasserstoffe 23

2.3.1 Oxidationsprozess 23

2.3.2 Einfluss der Molekülstruktur 28

2.4 Normprüfverfahren zur Selbstzündungscharakterisierung von Ottokraftstoffen und deren Übertragbarkeit auf moderne Brennverfahren 33

3 Experimentelle Versuchsträger und Methodik 44

3.1 Einhubtriebwerk/RCM (Rapid Compression Machine) 44

3.2 Modifizierter direkteinspritzender CFR-Prüfmotor 46

3.2.1 Compression Pre-Ignition Kennzahl (CPI) 47

3.2.2 Hot Spot Pre-Ignition Kennzahl (HSPI) 48

3.2.3 Direkteinspritzende Oktanzahl (DOZ) 49

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

3.3 Moderner Einzylinder-Forschungsmotor 52
3.4 Modernes Dreizylinder-Serienaggregat 54
3.4.1 Aufbau und Messtechnik 55
3.4.2 Analysemethodik der Klopf- und Vorentflammungsuntersuchung 56
4 Auswahl der zu untersuchenden Kraftstoffe 63
5 Ergebnisse und Diskussion 69
5.1 Kraftstoffbewertung am Einhubtriebwerk auf Basis der Zündverzugszeit 69
5.2 Kraftstoffbewertung am modifizierten DE-CFR-Prüfmotor 72
5.3 Kraftstoffbewertung am modernen Verbrennungsmotor 78
5.3.1 Gasphasenvorentflammung 78
5.3.2 Glühzündung 84
5.3.3 Konventionelles Klopfen 88
6 Validierung und Optimierung der entwickelten Prüfverfahren 95
6.1.1 Gasphasenvorentflammung - CPI 96
6.1.2 Glühzündung - HSPI 112
6.1.3 Konventionelles Klopfen - DOZ 124
7 Zusammenfassung 137
8 Literaturverzeichnis 141

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die stetig strenger werdende Abgasgesetzgebung und zunehmend ambitioniertere CO_2-Ziele bei Kraftfahrzeugen führen zu immer größeren Anstrengungen der Motorentwicklung. Neben der Verringerung des Kraftstoffverbrauches und der Senkung emittierter Schadstoffe ist eine hohe Fahrdynamik vorrangiges Ziel der Konzeption neuer Fahrzeuge [2].

Direkteinspritzende Ottomotoren mit reduziertem Hubraum (Downsizing) stellen die weltweit etablierte Technologie zur Erfüllung der angestrebten Ziele dar. Zusätzlich zu den motorischen Maßnahmen zur Wirkungsgradoptimierung gerät zunehmend der Kraftstoff in den Fokus der Entwicklung. Kraftstoffe mit biogener Basis, wie etwa Ethanol bieten neben der Unabhängigkeit von fossilen Energieträgern ein erhebliches Wirkungsgradpotenzial im motorischen Betrieb.

Die gesteigerte Leistungsdichte von Downsizing-Ottomotoren sowie der Einsatz moderner Kraftstoffe führen zu neuen Herausforderungen infolge irreguläre Verbrennungsphänomene (Glühzündung, Vorentflammung). In diesem Zusammenhang wurde unter anderem in [3] und [4] beobachtet, dass die genormten Kraftstoffkennzahlen Research-Oktanzahl (ROZ) und Motor-Oktanzahl (MOZ) zur Beschreibung des Glühzündungs- bzw. Vorentflammungsverhaltens nicht geeignet sind.

Abseits der eben genannten Verbrennungsanomalien wurde in [5] aufgezeigt, dass die ROZ und im Speziellen die MOZ ebenso keine hinreichend genaue Charakterisierung des kraftstoffspezifischen Klopfverhaltens moderner Motoren zulässt. Als Ursache der unzureichenden Klopfbewertung werden unter anderem die im Vergleich zum CFR-Motor abweichenden Betriebsrandbedingungen moderner Motoren genannt.

Mit dem Ziel der Glühzündungs- und Vorentflammungsbewertung sowie der korrekten Abbildung des Klopfverhaltens im modernen Motorbetrieb wurde in [1], [6] die Entwicklung neuer Kraftstoffkennzahlen vorgenommen. Die auf einem modifizierten direkteinspritzenden CFR-Motor gemessenen Verfahren Direkteinspritzende Oktanzahl (DOZ, Klopfverhalten), Compression Pre-Ignition (CPI, Gasphasenvorentflammung) und Hot Spot Pre-Ignition (HSPI, Glühzündung) wurden mit dem Fokus der Bewertung hochalkoholhaltiger Kraftstoffe entwickelt. Die Anwendbarkeit auf konventionelle Tankstellenkraftstoffe wurde in [1], [6] nicht untersucht.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

1.2 Zielsetzung

Vorrangiges Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung belastbarer Prüfverfahren zur Charakterisierung des kraftstoffspezifischen Selbstzündungsverhaltens in einem modernen Ottomotor. Hierbei ist zwischen der Vorentflammungs-, der Glühzündungs- und der Klopfneigung zu unterscheiden.

Als potenzielle, experimentelle Verfahren werden neben der ROZ und MOZ, die CPI, die HSPI und die DOZ aus [1] herangezogen. Die auf einem modifizierten direkteinspritzenden CFR-Motor basierenden Methoden (CPI, HSPI und DOZ) wurden gezielt auf hochalkoholhaltige Ottokraftstoffe entwickelt. Inwiefern diese Verfahren zur Selbstzündungsbewertung marktrelevanter Benzine geeignet sind soll detailliert analysiert werden. Zu diesem Zweck wird eine Kraftstoffauswahl von mehr als 30 Proben herangezogen. Die Kraftstoffmatrix beinhaltet neben alkoholhaltigen Kraftstoffen eine Vielzahl an DIN EN 228 konformen Benzinen sowie alkoholfreie Kraftstoffe.

Umfangreiche experimentelle Untersuchungen der CFR-basierten Verfahren bilden Grundlage der Korrelation zu modernen Motoren. Als moderner Versuchsträger dient neben einem Dreizylinder-Serienaggregat ein Einzylinder-Forschungsmotor. Auf Basis dieser Aggregate wird die Sensitivität unterschiedlicher Betriebsbedingungen auf das Selbstzündungsverhalten analysiert.

Die experimentellen Versuche begleitend dienen thermodynamische Analysen der motorspezifischen Brennraumbedingungen der Identifikation verbrennungstechnischer Unterschiede der einzelnen Aggregate. Zusätzlich dieser werden Daten reaktionskinetischer Analysen herangezogen um mittels fundamentaler Betrachtung des kraftstoffspezifischen Zündverhaltens die Betriebsrandbedingungen potenzieller Prüfverfahren abzuleiten.

Die Betrachtung umfangreicher chemisch-physikalischer Kraftstoffdaten soll zusätzlich etwaige Zusammenhänge zwischen spezifischen Kraftstoffparametern und der Selbstzündungsneigung aufzeigen.

Auf Basis der aus diesen Untersuchungen gewonnenen Erkenntnisse wird gegebenenfalls eine Adaption und Optimierung der potenziellen Prüfverfahren vorgenommen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Das dieser Dissertation zugrundeliegende Forschungsvorhaben der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschine (FVV) wurde in kooperativer Zusammenarbeit des Instituts für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der TU Wien, des Lehrstuhls für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University sowie der Juniorprofessur für physikalisch-chemische Grundlagen der Verbrennung (PCFC) der RWTH Aachen University durchgeführt [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

2 Grundlagen

2.1 Selbstzündungsphänomene im Ottomotor

Infolge der zunehmenden Leistungsdichte moderner Ottomotoren kommt es zu einem vermehrten Risiko irregulärer Verbrennungsphänomene. Bei diesen handelt es sich um unkontrollierte Selbstzündungen im noch unverbrannten Gemisch, welche durch Überschreiten einer Mindestzündenergie auftreten [8]. Abseits der klopfenden Verbrennung ist in diesem Zusammenhang die Vorentflammung bzw. die Glühzündung ein die spezifische Leistung begrenzendes Phänomen, welches in den letzten Jahren zunehmend in den Fokus der Entwicklung rückt [6], [9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19], [20].

Abbildung 2-1 kennzeichnet die Kennfeldbereich, in welchem das jeweilige Selbstzündungsphänomen einen wesentlichen Risikofaktor darstellt [21].

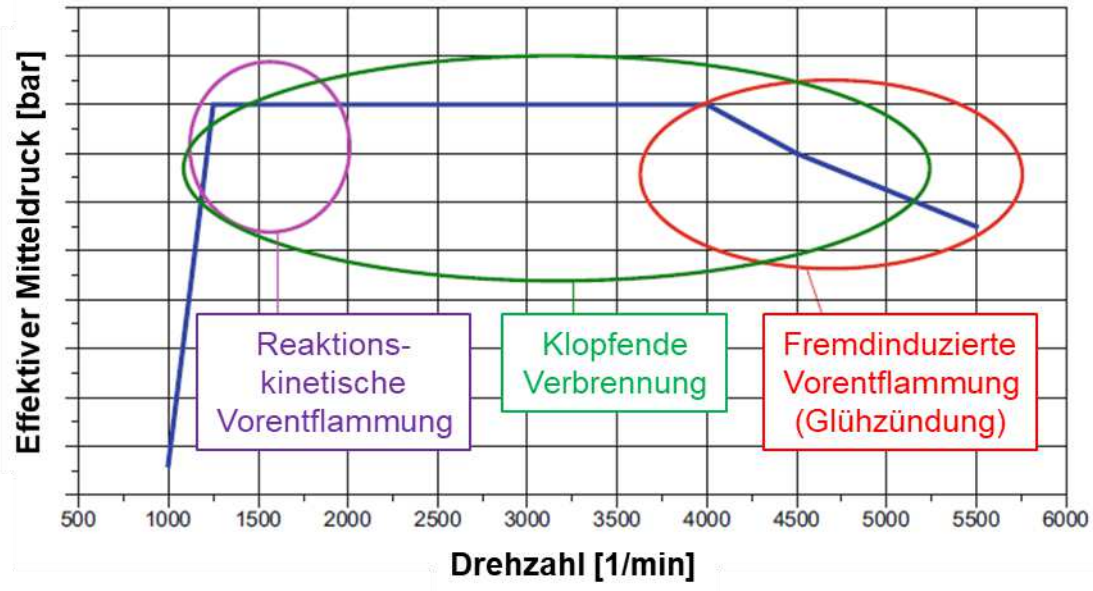


Abbildung 2-1: Bereiche der irregulären Verbrennungsphänomene im Betriebskennfeld [21].

Im Folgenden wird auf die eben genannten abnormalen Verbrennungsphänomene im Detail eingegangen. Die Betrachtung des zugrundeliegenden Selbstzündungsprozesses und der ablaufenden Oxidationspfade erfolgt in Kapitel 2.3.

2.1.1 Klopfende Verbrennung

Klopfen ist ein komplexer Selbstzündungsprozess, welcher sowohl von der Druck- und Temperaturhistorie im Brennraum, als auch von der chemischen Zusammensetzung des

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Kraftstoffes abhängig ist. Infolge der regulär eingeleiteten Verbrennung (Zündfunken) führt die deflagrative Flammenausbreitung (bis zu 25 m/s) zu einer, abseits der Kolbenkompression, zusätzlichen Verdichtung des unverbrannten Restgasgemisches (Endgas). Die dadurch beschleunigten chemischen Vorreaktionen im Endgas bewirken eine Reduktion des chemischen Zündverzuges und lokale Selbstzündungen sind bei Erreichen thermodynamisch kritischer Zustände die Folge. Bei dieser annähernd isochor ablaufenden Energieumsetzung entstehen Druckwellen, welche unter gegebenen Bedingungen eine um mehrere Zehnerpotenzen schnellere sekundäre Flammenausbreitung hervorrufen als jene der deflagrativen Verbrennung. In diesem Fall wird von einer Detonation gesprochen. Die Reflexion der sich ausbreitenden Druckwellen an der Brennraumgeometrie ruft anschließend das bekannte, klopfende bzw. klingelnde Geräusch der Verbrennungsanomalie hervor [8] [21].

Der hochfrequente Schwingungsanteil im Druckverlauf kann aufgrund der hohen Druckamplituden in kürzester Zeit zu Brennraumschäden (z.B. Kolben, Zylinderkopfdichtung, Ventile, Zündkerze) führen. Zusätzlich zur mechanischen Belastung tritt ebenfalls eine signifikante thermische Belastung auf (z.B. Feuersteg) [8], [22], [23], [24], [25]. Dementsprechend wird mittels eines in Richtung „Spät“ korrigierten Zündzeitpunktes das Klopfniveau aufgrund der dadurch niedrigeren Endgastemperatur [26] reduziert. Diese Maßnahme geschieht jedoch auf Kosten des thermodynamischen Wirkungsgrades bzw. der Performance [5], [27]. Betriebspunkte im ottomotorischen Kennfeld, deren thermodynamische Wirkungsgradoptima infolge der klopfenden Verbrennung nicht erreicht werden, werden als klopfbegrenzt betitelt. Der sich an der Klopfgrenze ergebende Zündzeitpunkt wird in diesem Betriebspunkt als klopfbegrenzter Zündzeitpunkt bezeichnet. Moderne Motorsteuergeräte werden dahingehend appliziert, um im klopfbegrenzten Bereich den Zündzeitpunkt der Verbrennung möglichst nahe an das Wirkungsgradoptimum zu legen. Körperschallsensoren (Klopfsensoren) detektieren eine klopfende Verbrennung und das Steuergerät korrigiert infolge den Zündzeitpunkt in Richtung unkritisch. Anschließend wird der Zündzeitpunkt erneut in Richtung Optimum gesteuert, bis wiederum die Klopfdetektion reagiert [23], [24].

Abbildung 2-2 gibt eine schematische Darstellung der Endgasverdichtung, welche zur Selbstzündung führt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

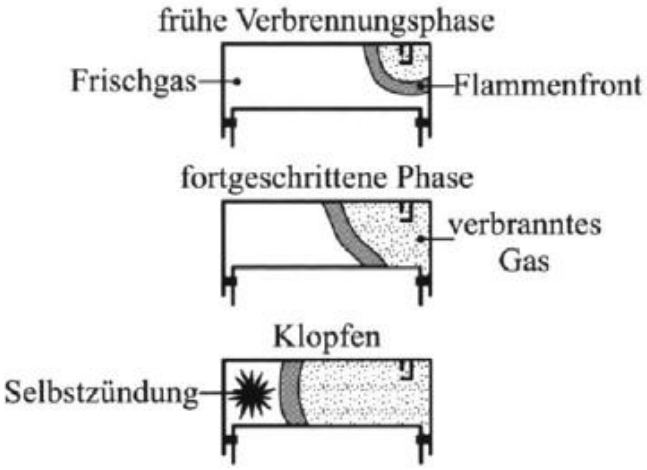


Abbildung 2-2: Schematische Darstellung der Endgasverdichtung und der anschließenden Selbstzündung [28].

Das im Brennraum eingeschlossene Gas bildet ein schwingungsfähiges System, dessen Randbedingungen (Brennraumform, Stoffwerte des Gases und Gaszustand) die Resonanzlage der sich ausbildenden stehenden Welle bestimmen. Bei den im Zylinderquerschnitt auftretenden Schwingungsmoden handelt es sich um Umlauf- und Radialschwingungen [29].

Nachfolgende Abbildung 2-3 zeigt exemplarische Zylinderdruckkurven einer regulären Verbrennung gegenüber unterschiedlich stark klopfender Verbrennungen.

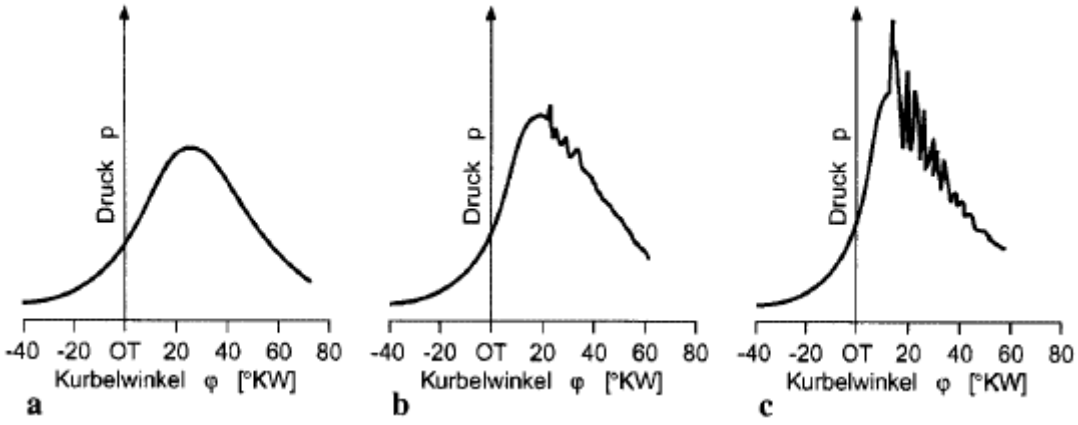


Abbildung 2-3: Zylinderdruckverläufe: **a** reguläre-, **b** leicht klopfende-, **c** stark klopfende Verbrennung [30].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Hinsichtlich der Entstehung einer klopfenden Verbrennung werden folgende Theorien vertreten [8]:

- Verdichtungstheorie:
  Aufgrund der Kolbenkompression und einer durch die fortschreitende Primärflammenfront hervorgerufenen zusätzlichen Verdichtung des Endgases kommt es lokal im Bereich geringerer Zündgrenzen zur Selbstzündung.
- Detonationstheorie:
  Stoßwellen der Primärflammenfront resultieren in verkürzten Zündverzugszeiten in unmittelbarer Nähe der durchlaufenden Welle. Die an die Stoßwelle gekoppelte Reaktionszone durchläuft den Brennraum mit Überschallgeschwindigkeit (detonativ). Anschließende Selbstzündungen in der Reaktionsfront führen zur weiteren Beschleunigung der Flammenfront bis zu 2000 m/s [29].
- Kombinationstheorie:
  Diese Theorie entspricht einer Kombination der zuvor genannten. Die Selbstzündung im Endgas bewirkt eine sich mit Unterschallgeschwindigkeit ausbreitende Sekundärflamme. Stärker klopfende Arbeitsspiele entstehen infolge einer durch Stoßwellen in der Primärflammenfront getragene beschleunigte (Überschallgeschwindigkeit) Reaktionsfront [9], [13], [31].

Eine Vielzahl an inner- und außermotorischen Maßnahmen reduzieren die Klopfneigung eines Ottomotors [8], [22], [23], [24], [25].

- Geringes Verdichtungsverhältnis
- Geringe Zylinderfüllung
- Später Zündzeitpunkt
- Erhöhtes Luft-Kraftstoff-Verhältnis (erhöhter Zündverzug)
- Reduzierte Brennraumtemperatur (Ansaugluft, Abgasrückführung, Motorkühlung)
- Hohe Strömungsgeschwindigkeit
- Hohe Flammengeschwindigkeit
- Kleines Volumen/Oberflächen-Verhältnis
- Kompakte Brennraumform
- Kurze Flammenwege (zentrale Zündkerzenlage)

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Insbesondere das Betriebsmittel Kraftstoff zeigt ein erhebliches Potenzial, um Klopfen zu unterbinden. In diesem Zusammenhang dienen die ROZ und die MOZ als Maß der kraftstoffspezifischen Klopffestigkeit. Detailliertes dazu in Kapitel 2.4.

2.1.2 Vorentflammung

Die Vorentflammung ist ein Selbstzündungsphänomen, welches in Ottomotoren stochastisch und nicht vorhersagbar im Low-End-Torque Bereich des Kennfeldes auftritt und ebenfalls als Low-Speed Pre-Ignition (LSPI) bezeichnet wird [10], [11], [12], [14], [15], [18], [32], [33], [34], [35], [36]. Durch die hohe Leistungsdichte und den damit einhergehenden kritischen Brennraumbedingungen von turboaufgeladenen Ottomotoren sind Vorentflammungen überwiegend in Downsizing-Motoren anzutreffen [4]. Kennzeichnend für ein solches Phänomen ist, dass die Verbrennung deutlich vor der regulär zu erwartenden Verbrennung abläuft und von einem signifikant hohen Druckmaximum begleitet wird. Bei sehr früher Selbstzündung, teils vor Einleitung des regulären Zündfunkens, geht die Vorentflammung in ein stark klopfendes Ereignis über (wie in Abbildung 2-4 dargestellt). Solch ein Phänomen wird oftmals als Mega-Knock bzw. Super-Knock bezeichnet [6], [9], [15], [32], [35], [37].

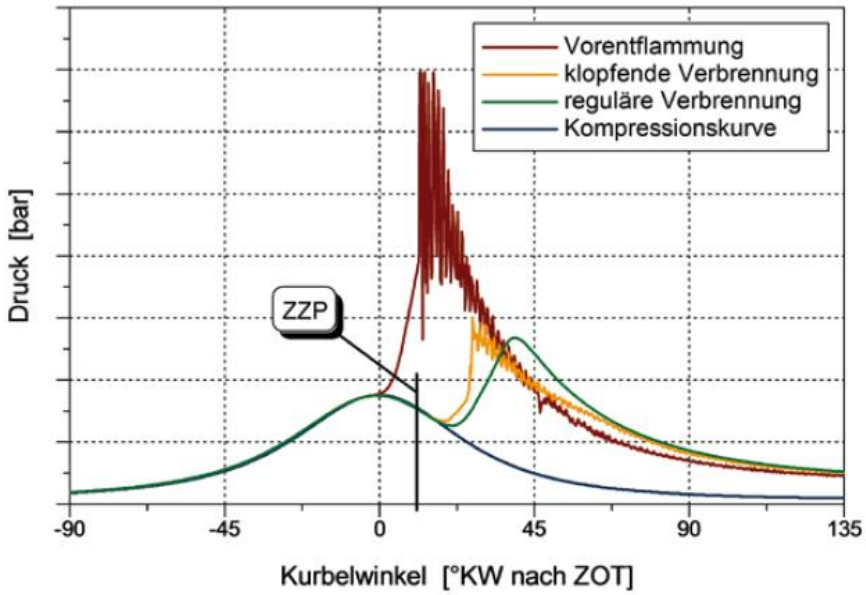


Abbildung 2-4: Vergleich einer stark klopfenden Vorentflammung (Super-Knock) gegenüber einer „konventionell“ klopfenden Verbrennung bzw. einer regulären Verbrennung [18].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Eine weitere Eigenschaft dieser Art der abnormalen Verbrennung ist das Auftreten in intermittierenden Serien. Nach Eintritt der 1. Vorentflammung (initiale Vorentflammung) kann es unter gewissen Umständen zu einem selbsterhaltenden Mechanismus kommen, welcher eine Reihe von Vorentflammungen auslöst. Reguläre Verbrennungszyklen wechseln hierbei mit Vorentflammungszyklen ab, wobei die Länge der Serien (1 bis >5) als auch Anzahl der regulären Zyklen zwischen zwei Vorentflammungen (0 bis >5) eine deutliche Variation aufweisen [32]. Abbildung 2-5 zeigt exemplarisch eine intermittierende Vorentflammungsserie. In [18], [38] konnte auf Basis optischer Untersuchungen nachgewiesen werden, dass unter anderem Partikel einen signifikanten Einfluss auf die Entstehung einer fortlaufenden Vorentflammung haben.

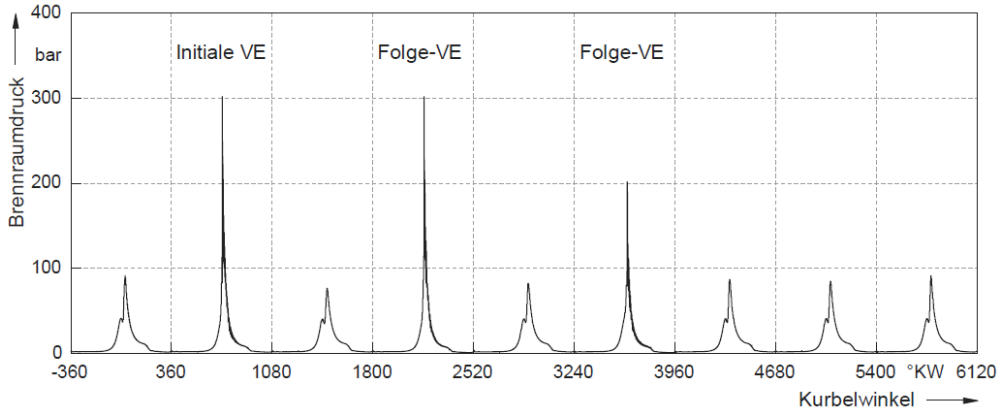


Abbildung 2-5: Beispiel einer intermittierenden Vorentflammungsserie [37].

Trotz umfangreicher Forschungsaktivitäten konnte aufgrund der Komplexität des Entstehungsmechanismus bislang keine umfassende Erklärung der Ursache einer initialen bzw. stochastischen Vorentflammung gefunden werden. Im Laufe der letzten Jahre wurde eine Vielzahl an möglichen Faktoren für das Auftreten der initialen Vorentflammung identifiziert. Abbildung 2-6 gibt einen Überblick potenzieller Einflussparameter, wobei je nach Auslegung des Aggregates eine unterschiedliche Gewichtung auf diesen Parametern liegt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

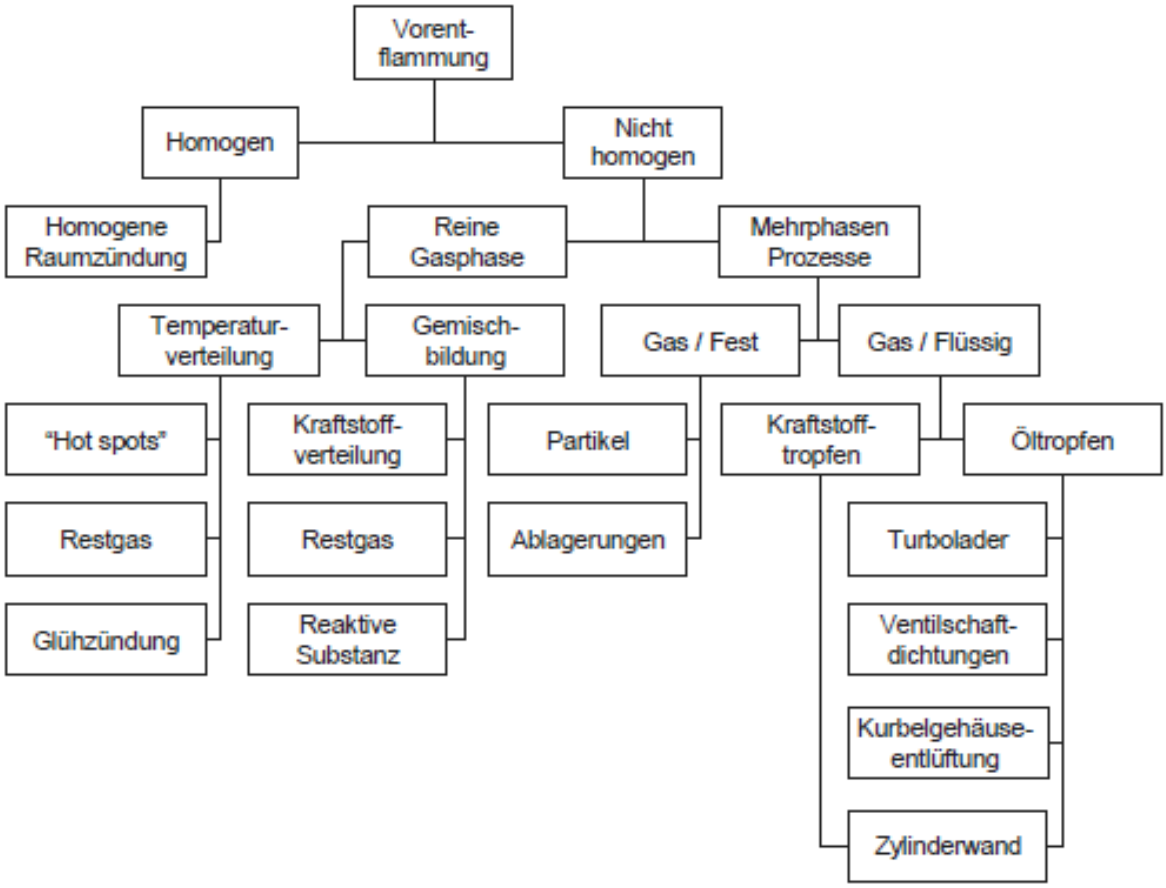


Abbildung 2-6: Potenzielle Ursachen einer Vorentflammung [37].

Neben den potenziellen Zündquellen wie etwa Ablagerungen bzw. Partikel [19], [38] sind das Öl sowie dessen Additive mittlerweile unbestrittene Einflussparameter der stochastischen Vorentflammung. Eine Vielzahl an Untersuchungen hat nachgewiesen, dass die Kraftstoff-Öl-Interaktion infolge der Zylinderwandbenetzung eine wesentliche Rolle im Entstehungsprozess der irregulären Verbrennung spielt [11], [14], [38], [39], [40], [41].

Motorparameter wie etwa die Kühlmitteltemperatur, das Ladungsbewegungsniveau sowie das Spraytargeting bzw. die Einspritzstrategie liegen in unmittelbarem Zusammenhang mit der Spraypenetration der Zylinderwand und zeigen dementsprechend eine signifikante Auswirkung auf die Vorentflammungshäufigkeit. Abseits motorischer Betriebsparameter ist der konstruktiven Auslegung des Kolbenspaltes nach [11], [42] ein Einfluss auf die LSPI-Häufigkeit nachzuweisen. In diesem Fall liegt die Annahme zugrunde, dass es im Kolbenspalt zur Akkumulation eines Kraftstoff-Öl-Reservoirs kommt, welches bei ausreichender Menge zum Eintrag einzelner Kraftstoff-Öl-Tropfen in den Brennraum führt und anschließend als Zündquelle dient [32], [38], [43].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Zusätzlich erwähnt [38] auf Basis simulativer Betrachtungen ein akkumulatives Verhalten reaktiver intermediärer Spezies im Kolbenringspalt. Diese aufgrund einer unvollständigen Verbrennung hervorgehenden Spezies führen im weiteren Verlauf zur Selbstzündung.

Abseits der soeben beschriebenen potenziellen Ursachen einer initialen LSPI wird dem Kraftstoff ebenfalls ein signifikanter Einfluss auf die Vorentflammungsneigung im Motorbetrieb angerechnet. Grundsätzlich ist der chemische Zündverzug der Kraftstoffe im relevanten Temperaturbereich des Motorbetriebes nicht hinreichend kurz, um als alleinige Ursache der LSPI herangezogen zu werden [38]. Trotz dieser Tatsache führen verschiedene Kraftstoffzusammensetzungen zu deutlichen Unterschieden in der Vorentflammungswahrscheinlichkeit. Es wurde festgestellt, dass unter anderem die kraftstoffspezifischen Verdampfungseigenschaften eine wesentliche Rolle bei der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes spielen [3], [4], [11].

2.1.3 Glühzündung

Bei der Glühzündung handelt es sich um ein selbstverstärkendes bzw. selbsterhaltendes irreguläres Verbrennungsphänomen vor Eintritt der regulären Zündung. Eine fortlaufende Glühzündungsserie ist mittels einer Zündunterbrechung nicht mehr zu kontrollieren [23], [44].

Klopfende als auch vorentflammende Zyklen weisen einen erhöhten Wärmeeintrag in die Brennraumwände auf. Die hohe thermische Belastung kann wiederum zu beschleunigten Selbstzündungen im angrenzenden Gas führen, welche in einer fortsetzenden Aufheizung der Strukturen resultieren. Im Zuge dieser selbstverstärkenden Charakteristik kommt es zu einer immer früheren Verbrennung, begleitet von zunehmenden Klopfamplituden. Letztendlich findet in einer fortgeschrittenen Glühzündung der vollständige Kraftstoffumsatz noch deutlich vor dem oberen Totpunkt der Kolbenkompression statt und eine klopfende Verbrennung ist aufgrund des äußerst frühen Gemischumsatzes nicht mehr auszumachen. Da in diesem Fall die heißen Verbrennungsprodukte durch den fortlaufenden Kompressionshub verdichtet werden, ist ein signifikant hohes Druck- bzw. Temperaturniveau zu beobachten. Ein sofortiger Motorschaden ist an dieser Stelle nicht auszuschließen. Abbildung 2-7 zeigt beispielhaft die Zylinderdruckverläufe einer selbstverstärkenden Verbrennung, welche in eine Glühzündung übergeht [37].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

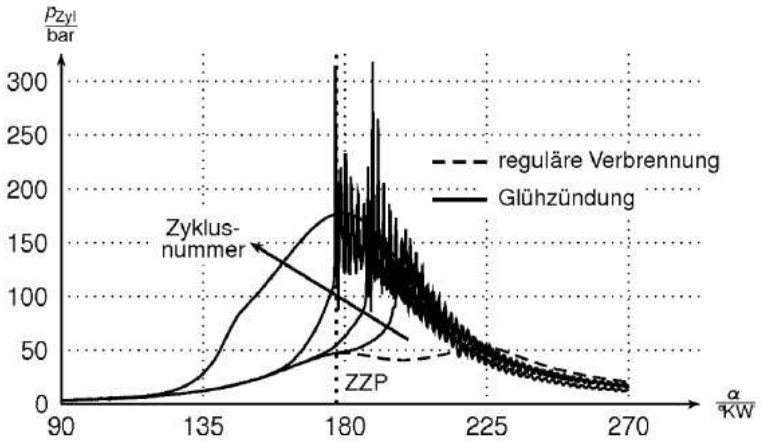


Abbildung 2-7: Selbstverstärkende Charakteristik der Glühzündung [37].

Grundsätzlich kann das Phänomen der Glühzündung durch die geeignete Wahl des Kühlsystems bzw. des Wärmewertes der Zündkerze zuverlässig unterbunden werden [21], [30], [37], [44]. Weitere auf die Glühzündungsneigung einflussgebende Motorbetriebsparameter sind nach [4], [44], [45], [46], [47] die Drehzahl, die Last, der Saugrohrdruck und das Luft-Kraftstoff-Verhältnis.

Abseits der korrekten Auslegung des Verbrennungsmotors wird (wie bereits bei der klopfenden Verbrennung sowie der LSPI) dem Kraftstoff ebenfalls eine erhebliche Sensitivität auf die Glühzündungsneigung zugeschrieben. So zeigen [1], [44], [45], [48] dass hochalkoholhaltige Kraftstoffe eine geringere Glühzündungsresistenz haben, als es bei konventionellen Ottokraftstoffen der Fall ist. Darüber hinaus wird in [4], [46] eine betriebspunktabhängige Glühzündungsresistenz der Kraftstoffe beobachtet.

2.2 Kraftstoffe im ottomotorischen Einsatz

Basis der Funktionalität eines Verbrennungsmotors bildet die Oxidation von Brennstoff und Sauerstoff zur Nutzung der chemisch gebundenen Energie für mechanische Arbeit. Im Fall des konventionellen Ottomotors dient vor allem das aus dem Destillationsprozess von Mineralöl gewonnene Benzin als Brennstoff der Verbrennungskraftmaschine. Ottokraftstoff als leichtsiedender Bestandteil des Mineralöls besteht aus hunderten verschiedenen chemischen Verbindungen, deren Zusammensetzung die chemisch-physikalische Charakteristik und somit die motorischen Eigenschaften des Kraftstoffes bestimmen. Abseits des konventionellen fossilen Energieträgers, einem Gemisch aus Reformaten, Crackbenzinen (Alkene), Pyrolyse-Benzinen, Iso-Alkanen, Butan und Alkylaten, sind infolge massiver politischer Anstrengungen alternative Ersatzkomponenten wie Alkohole bzw. Ether seit einigen Jahren am Vormarsch. In

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Richtlinie 2009/30/EG [49] haben sich die EU-Staaten verpflichtet, die Lebenszyklustreibhausemissionen pro Energieeinheit der Kraftstoffe oder Energieträger auf Basis nachhaltiger, erneuerbarer Energiequellen um bis zu 10 % zu reduzieren. So ist bereits heute in Europa dem konventionellen Benzin bis zu 10 % Ethanol aus nicht fossilen Quellen (E10) beigemengt. Weitere Staaten wie etwa die USA, Brasilien oder Schweden weisen Ethanol-Anteile mit über 70 % auf [21], [23], [50].

2.2.1 Aufbau und Zusammensetzung

Ein Kraftstoff fossiler Basis besteht aus mehreren hundert verschiedenen Kohlenwasserstoffen sowie geringen Mengen anderer organischer Verbindungen und Additiven. Ursache der Vielzahl an natürlich vorkommenden organischen Kohlenwasserstoffverbindungen (C_xH_y) ist das vierwertige Kohlenstoffatom (C-Atom). Dank dieser Eigenschaft ist es dem C-Atom möglich gerade, verzweigte sowie verschiedenste ringförmige Verbindungen in einfachen oder mehrfachen Bindungen im Molekül einzugehen. Die Molekülstruktur und –länge hat hierbei maßgeblichen Einfluss auf die chemisch-physikalische Charakteristik und somit unmittelbar auf das Gemischbildungs- und Verbrennungsverhalten im Motor. Die motorischen Betriebsrandbedingungen und daraus abgeleitete Forderungen, wie etwa eine geringe Selbstzündungsneigung, führen dazu, dass der Ottobrennstoff vorzugsweise kurzkettige Moleküle (zwischen 4 bis 12 C-Atome) enthält [21], [50], [51], [52].

Die Vielzahl an Molekülen kann auf Basis der Anordnung und Art der Atombindungen in einzelne Gruppen unterteilt werden und ermöglicht so einen strukturierten Überblick der verschiedenen Komponenten. Neben den aliphatischen Kohlenwasserstoffverbindungen der Alkane (Einfachbindung), der Alkene (mindestens eine Zweifachbindung) und der Alkine (mindestens eine Dreifachbindung) bilden aromatische Verbindungen weitere wesentliche Kohlenwasserstoffkomponenten im Benzin. Darüber hinaus gibt es eine Vielzahl sauerstoffhaltiger $C_xH_yO_z$ Kohlenwasserstoffverbindungen (Alkohole, Ether, Ketone und Aldehyde) die einen wesentlichen Beitrag zur ottomotorischen Verbrennung liefern.

Nachfolgend werden die relevanten Stoffgruppen detaillierter erläutert.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Alkane (Paraffine)

Alkane bzw. gesättigte Kohlenwasserstoffe zählen zu den aliphatischen Kohlenwasserstoffen und bilden anteilig die größte Gruppe im motorischen Brennstoff. Die Molekülstruktur der Alkane weist lediglich Einfachbindungen auf und lässt sich in unverzweigte (Normal-Alkane bzw. n-Alkane), verzweigte (Iso-Alkane) sowie cyclische (Cycloalkane bzw. Naphthene) bzw. kompliziertere bicyclische-/tricyclische/polycyclische Alkane unterteilen. Die Summenformel der Alkane lautet C_nH_{2n+2} und stellt den höchstmöglichen Gehalt an Wasserstoff dar [21], [23], [50], [51].

Abbildung 2-8 gibt eine Übersicht der Strukturformeln einfacher Alkane.

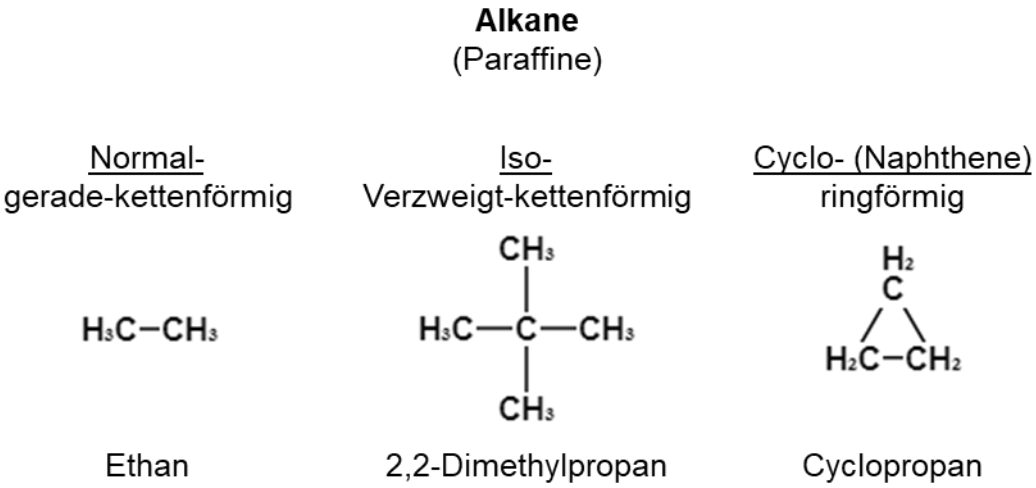


Abbildung 2-8: Exemplarische Strukturformeln der Alkane.

Verzweigte Alkane (Isomere) leiten sich von den geraden, unverzweigten Alkanen ab. Sie besitzen dieselbe Summenformel C_nH_{2n+2} jedoch mit abweichender Molekülstruktur. Die Isomere unterscheiden sich somit nur durch die Reihenfolge der C-C und C-H Bindungen. Die abweichende Molekülstruktur führt jedoch dazu, dass physikalisch-chemische Eigenschaften von Isomeren gleicher C-Atomanzahl signifikant abweichen können [51].

Als typischer Vertreter des Benzins sei in diesem Zusammenhang n-Heptan (n-Alkan), Isooktan (iso-Alkan) und Cyclohexan (Cycloalkan) genannt.

Alkene (Olefine)

Alkene sind durch das Vorhandensein mindestens einer Doppelbindung im Molekül charakterisiert und gehören zur Gruppe der ungesättigten Kohlenwasserstoffe. Neben den kettenförmig unverzweigten (n-Alkene) bzw. verzweigten (iso-Alkene) Molekülstrukturen gibt es ebenfalls cyclische Strukturen (Cycloalkene). Aufgrund der

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

äußerst geringen Menge an Alkenen im Rohöl findet die Herstellung über Crackprozesse aus schweren Paraffinverbindungen statt [50].

Abbildung 2-9 zeigt beispielhaft die Strukturformel des Alkens (eine Doppelbindung) Ethen und des Alkadiens (zwei Doppelbindungen) Propadien

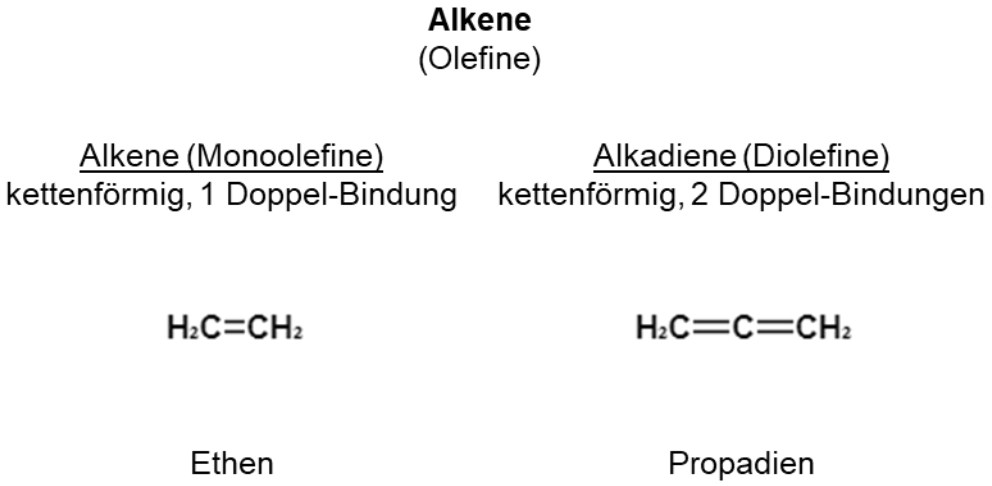


Abbildung 2-9: Exemplarische Strukturformeln der Alkene.

Die Doppelbindung resultiert unter anderem in einer gegenüber des vergleichbaren n-Paraffins höheren Klopffestigkeit des Alkens. Die begrenzte Langzeitstabilität und die Eigenschaft unter Anwesenheit von Sauerstoff zu verharzen führt gemäß DIN EN 228 zu einem begrenzten Olefin-Gehalt von maximal 18 % vol. im Benzin [21], [23], [50], [51].

Aromaten

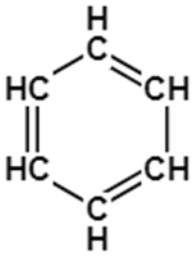
Aromaten bilden jene Gruppe der ringförmig ungesättigten Kohlenwasserstoffe deren Grundstruktur der Benzolring mit 6 C-Atomen und drei Doppelbindungen darstellt. Abbildung 2-10 zeigt die Strukturformel dieser Komponente.

Neben den Alkanen bilden Aromaten den größten Anteil des Benzins. Typischer Vertreter im Ottokraftstoff sind C_7- bis C_9-Aromaten. Aufgrund der kompakten Molekülstruktur bilden Aromaten thermisch sehr stabile Moleküle hoher Zündtemperatur sowie hoher Klopffestigkeit. Die hohe thermische Beständigkeit führt jedoch dazu, dass es bei Kraftstoffen hohen Aromaten-Gehaltes zu ungünstigen Partikel- bzw. Kohlenwasserstoff-Emissionen kommt [23], [50].

Der Aromaten-Gehalt ist lauf DIN EN 228 auf 35 % vol. begrenzt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Aromaten
ringförmig, Doppel-Bindungen



Benzol

Abbildung 2-10: Benzol als Grundbaustein aromatischer Verbindungen.

Sauerstoffhaltige Kohlenwasserstoffverbindungen (Oxygenate)

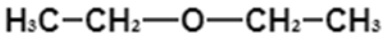
Innerhalb der sauerstoffhaltigen Kohlenwasserstoffe ($C_xH_yO_z$-Verbindungen) wird zwischen Alkoholen, Ethern, Ketonen und Aldehyden unterschieden, wobei nachfolgend ausschließlich auf die beiden Erstgenannten eingegangen wird [23].

Abbildung 2-11 gibt eine exemplarische Übersicht sauerstoffhaltiger Kohlenwasserstoffverbindungen.

Alkohole
-OH; Hydroxylgruppe

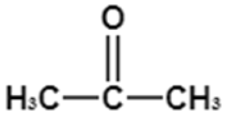
Ethanol

Ether
O-Brücke; Alkoxygruppe



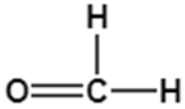
Diethylether

Ketone
-CO-; Carbonylgruppe



Aceton

Aldehyde
-CHO- Gruppe



Formaldehyd

Abbildung 2-11: Strukturformeln sauerstoffhaltiger Kohlenwasserstoffe.

Im Fall der Alkohole stellt die Hydroxylgruppe (R-O-H) die funktionelle Gruppe des Moleküls dar. Die Abkürzung R beschreibt darin die restliche Alkylgruppe

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek WIEN Your knowledge hub

(Kohlenwasserstoffteil des Moleküls). Die einfachsten und für die ottomotorische Verbrennung relevantesten Vertreter der Alkohole sind Ethanol (C_2H_5-OH) bzw. Methanol (CH_3OH) und können sowohl in Reinform als auch in Mischkraftstoffen eingesetzt werden. Im speziellen Ethanol steht als Biokraftstoff immer wieder im Fokus der Entwicklung. So ist dieser bereits als E85 (85 % Ethanol und 15 Benzin) in speziellen Fahrzeugen (Felxible-Fuel-Fahrzeugen) in USA und Schweden erhältlich, aber auch als bis zu 10 % vol. beigemengte Kraftstoffkomponente (E5 bzw. E10) in der EU im Einsatz [22], [23], [51].

Neben einer Vielzahl an verbrennungstechnischen Vorteilen [53], [54], [55] (reduzierte Klopfneigung, hohe Brenngeschwindigkeit, hohe Verdampfungsenthalpie) haben Alkohole jedoch einen niedrigeren volumetrischen Heizwert als konventionelle Ottokraftstoffe, wodurch es zu einem deutlichen Mehrverbrauch kommt. Des Weiteren stellen die vollkommene Mischbarkeit mit Wasser, die Dampfdruckanomalie sowie die Materialverträglichkeit (Elastomere, Aluminium) abseits der vorhandenen Kaltstarproblematik (hoher Siedepunkt) weitere Herausforderungen hoher Beimischraten (>10 % vol.) dar [22], [23], [51].

Infolge des Verbleiungsverbotes von Ottokraftstoffen und der damit einhergehenden Reduktion der kraftstoffspezifischen Klopffestigkeit (Oktanzahlverlust) kommen abseits der „klassischen“ klopfresistenten Komponenten wie etwa Alkoholen, vermehrt Ether zum Einsatz. Diese lassen sich durch Veretherung aus Bioethanol (ETBE – Ethyl-Tertiär-Buthyl-Ether) bzw. aus Biomethanol (MTBE – Methyl-Tertiär-Buthyl-Ether) herstellen. Die Alkoxygruppe (R-O-R‘) beschreibt die funktionelle Gruppe und ersetzt eine CH_2-Gruppe durch ein Sauerstoffatom. Anwendungstechnische Nachteile wie zum Beispiel die Dampfruckanomalie der Alkohole sind in diesem Fall nicht ausgeprägt. Eine gute Mischbarkeit mit Ottokraftstoff ohne Erhöhung der Flüchtigkeit bei geringer Wasserempfindlichkeit, eine hohe Oktanzahl sowie ein niedrigerer Dampfdruck sind charakterisierend. Der niedrigere Sauerstoffanteil gegenüber Ethanol und Methanol führt zu einer geringeren Absenkung des volumetrischen Heizwertes bei Zumischung zu Benzin, wodurch ebenfalls der Kraftstoffverbrauch im Vergleich zu Alkoholmischungen reduziert ist [22], [23], [51].

MTBE und ETBE werden heutzutage großtechnisch hergestellt und sind in Deutschland bereits trotz hoher Herstellkosten durchschnittlich zu etwa 10 % dem SuperPlus Benzin beigemischt [23], [50]. Bisher war seitens der Europäischen Union der sauerstoffgehalt im Kraftstoff auf 2,7 % (m/m) begrenzt wodurch der Einsatz von Ethern und Alkoholen

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

geringfügig war. Aufgrund politischer Bestrebungen nach höheren Kraftstoffanteilen aus nachwachsenden Rohstoffen wurde der maximale Sauerstoffgehalt auf 3,7 % (m/m) angehoben (Super E10 Kraftstoffe). Weiterhin ist es jedoch verpflichtend eine sogenannte Schutzsorte mit max. 2,7 % (m/m) (Super E5 Kraftstoffe) innerhalb der EU anzubieten, um eventuelle Kompatibilitätsprobleme mit älteren Fahrzeugen zu unterbinden. Die aus den beiden zulässigen O_2-Grenzen abgeleiteten Maximalanteile an Methanol, Ethanol bzw. Ethern sind Tabelle 1 zu entnehmen.

Tabelle 1: Gemäß DIN EN 228 einzuhaltender Maximalanteil relevanter Oxygenate auf Basis der zulässigen O_2-Grenzwerte. Kraftstoffe mit einem O_2-Gehalt größer 2,7 % (m/m) sind mit dem Zusatz E10 zu kennzeichnen [23].

Komponente % (V/V)	**Zugelassene Komponenten nach DIN EN 228**	
	O_2-Gehalt max. 2,7 % (m/m)	O_2-Gehalt max. 3,7 % (m/m)
Methanol max.	3,0 % (V/V)	3,0 % (V/V)
Ethanol max.	5,0 % (V/V)	10,0 % (V/V)
Ether* max.	Volumenbeimischung auf O_2-Gehalt von 2,7 % (m/m) begrenzt	22,0 % (V/V)

* MTBE, TAME und ETBE sowie andere mit min. 5 C-Atomen

Inwiefern sich die Selbstzündungsneigung der verschiedenen Kohlenwasserstoffkomponenten bzw. Stoffgruppen unterscheidet soll anhand Abbildung 2-12 illustriert werden [30], [56]. Die Klopfneigung wird hierbei auf Basis eines kritischen Verdichtungsverhältnisses beschrieben, bei welchem unter definierten Motorbetriebsbedingungen Klopfen eintritt. Ein hohes kritisches Verdichtungsverhältnis kennzeichnet somit eine selbstzündungsresistentere Komponente. Die Untersuchung in [56] enthält keine vergleichbaren Daten sauerstoffhaltiger Komponenten.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

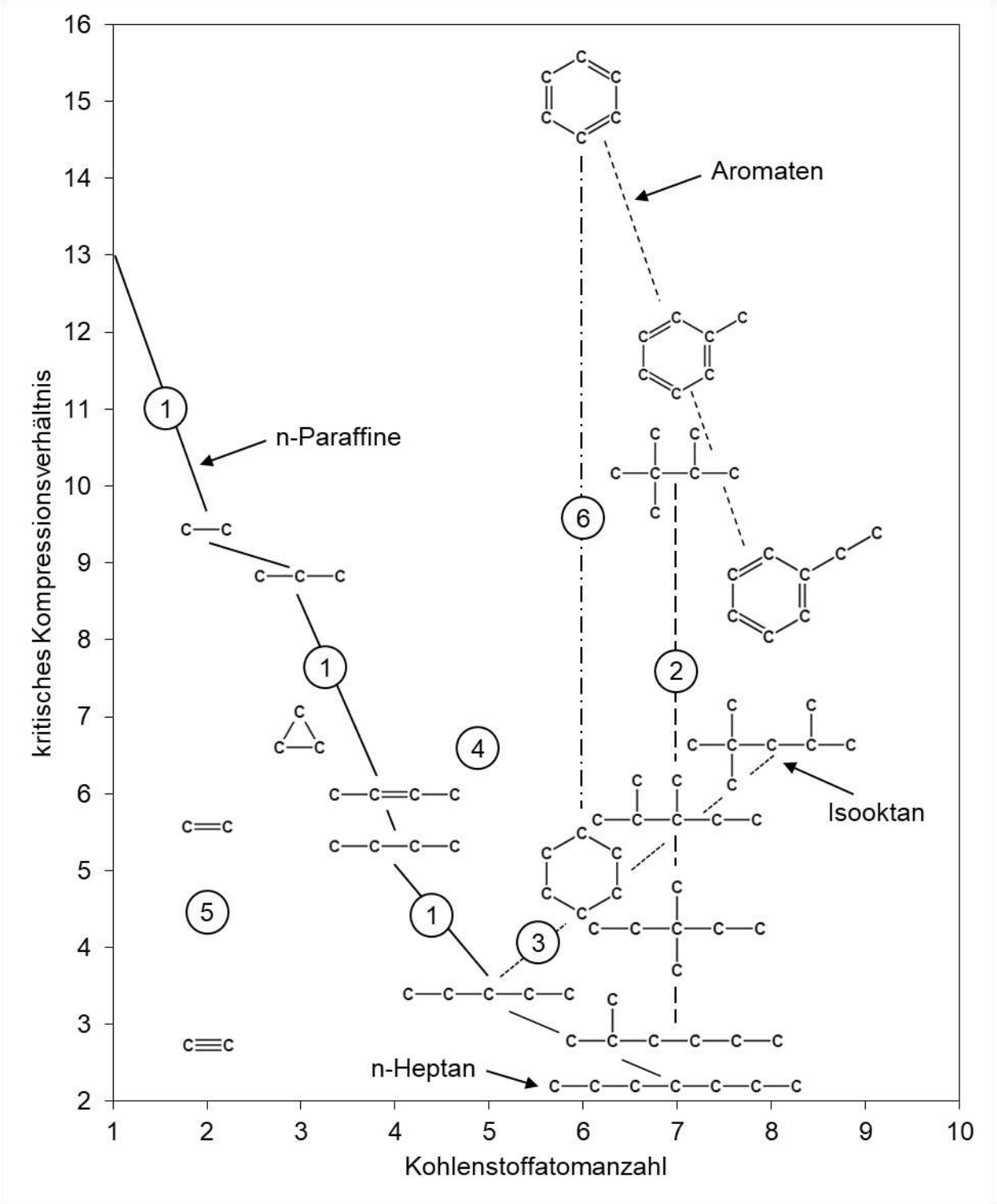


Abbildung 2-12: Selbstzündungsneigung unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe in Abhängigkeit der Kohlenstoffatomanzahl [30], [56].

Mit zunehmender Kettenlänge der Alkane (Paraffine) (1) kommt es zu einer erhöhten Klopfneigung. Durch vorhandene Kettenverzweigungen und dadurch kompakterer Molekülstruktur nimmt die Reaktivität wiederum ab (2). Zusätzlich verzweigte

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Methylgruppen (CH_3) am Ende des Alkan-Moleküls führen zu einer weiteren Absenkung der Reaktivität (3).

Im Fall der Alkene (Olefine) zeigt eine Doppelbindung auf Basis dieser Daten lediglich einen geringen Effekt (4), welcher jedoch mit der Kettenlänge zunimmt. Zwei bzw. drei Doppelbindungen im Molekül führen generell zu einer Erhöhung der Selbstzündungsresistenz. Ausnahmen stellen in diesem Zusammenhang Ethen (C_2H_4) und Propen (C_3H_6) bzw. das Alkin Ethin (Acetylen) (C_2H_2) dar, welche trotz Zwei- bzw. Dreifachverbindung ein gegenüber dem gesättigten Ethan deutlich reduzierte Klopfresistenz zeigen (5).

Hinsichtlich der Cycloalkane (Naphthene) ist festzustellen, dass diese im Vergleich zum korrespondierenden Aromat eine signifikant höhere Reaktivität erkennen lassen (6). Mit zunehmender Länge der Seitenkette nimmt die Klopfresistenz beider ab. Eine Verzweigung der Seitenkette bewirkt im Allgemeinen eine reduzierte Reaktivität der Cycloalkane bzw. Aromaten.

2.2.2 Charakterisierung von Ottokraftstoffen

In Richtlinie 98/70/EG [57] des Europäischen Parlaments und des Rates werden verpflichtende technische Spezifikationen der Kraftstoffe (Otto- sowie Dieselkraftstoff) auf Basis von gesundheits- und umweltrelevanten Aspekten definiert. Unter anderem wurden die Abkehr der verbleiten Ottokraftstoffe sowie die Reduktion des Aromaten-, Olefinen-, Benzol- und Schwefelgehaltes forciert. Darüber hinaus erfolgt in Kombination mit der DIN EN 228 [58] ein internationaler Standard zur Qualitätssicherung der unverbleiten Ottokraftstoffe. Abseits dieser Normung hat die weltweite Automobilindustrie eine sogenannte Fuel Charter (WWFC – Worldwide Fuel Charter) aufgesetzt, in welcher Kraftstoffspezifikationen in vier Qualitätsstufen festgelegt werden [21], [23].

Betreffend die Charakterisierung der Ottokraftstoffe nach DIN EN 228 werden zusätzlich zu den maximal zulässigen Grenzwerten einzelner Stoffgruppen (z.B. Benzol-Gehalt) ebenfalls physikalische und chemische Mindestanforderungen festgelegt. So sind beispielsweise Dichte, Siedeverlauf, Dampfdruck, Oxidationsstabilität aber auch verbrennungstechnische Größen wie die Klopffestigkeit definiert. Neben einer Vielzahl an Anforderungen listet die DIN EN 228 ebenso die zu verwendenden Normprüfverfahren zu Ermittlung der jeweiligen Parameter.

Ein Auszug der DIN EN 228 ist in Tabelle 2 zu sehen [21], [23].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Tabelle 2: Auszug der DIN EN 228. Anforderungen eines genormten Ottokraftstoffes [22], [23].

		Anforderungen nach DIN EN 228		
Kennwerte	**Einheit**	**SuperPlus**	**Super**	**Normal**
Dichte bei 15°C	[kg/m^3]	720-775		
Klopffestigkeit ROZ MOZ		 min. 98,0 min. 88,0	 min. 95,0 min. 85,0	 min. 91,0 min. 82,5
Bleigehalt	[mg/l]	maximal 5		
Siedeverlauf* Verdampfte Menge (Klasse A) bei 70 °C, E70 bei 100 °C, E100 bei 150 °C, E150 Verdampfte Menge (Klasse D/D1) bei 70 °C, E70 bei 100 °C, E100 bei 150 °C, E150 Siedeendpunkt FBP (Klasse A/D/D1)	[% (V/V)] [°C]	 20,0-48,0 46,0-71,0 min. 75,0 22,0-50,0 46,0-71,0 min. 75,0 maximal 210		
Flüchtigkeitskennziffer VLI** (VLI = 10 x VP + 7 x E70) Klasse D1	 Index	 maximal 1.150		
Destillationsrückstand	[% (V/V)]	maximal 2		
Dampfdruck (DVPE) Klasse A Klasse D/D1	[kPa]	 45,0-60,0 (Sommer) 60,0-90,0 (Winter)		
Abdampfrückstand	[mg/100 ml]	maximal 5		
Benzolgehalt	[% (V/V)]	maximal 1,0		
Schwefelgehalt	[mg/kg]	maximal 10*		
Oxidationsstabilität	min.	minimal 360		
Kupferkorrosion	Korrosionsgrad	maximal 1		

* Schwefelgehalt in Gesamt-EU seit Anfang 2009 maximal 10 mg/kg
Klasse D: 16.11.-15.03. (Winter)
Klasse D1: 16.03-30.04./01.10.-15.11. (Übergang)
** Vapor-Lock-Index

Durch die zunehmende Substitution des konventionellen Benzins durch alternative Kraftstoffe (Oxygenate) ist es unumgänglich den Basiskraftstoff dementsprechend anzupassen, dass dessen chemischen und physikalischen Eigenschaften weiterhin der Normung entsprechen. An dieser Stelle sei exemplarisch die Änderung des Siedeverlaufes durch einen erhöhten Ethanol-Anteil genannt, wodurch die Substitution leichtflüchtiger HC-Komponenten durch schwerere Kraftstoffkomponenten notwendig ist.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Abbildung 2-13 illustriert anhand eines Tortendiagrammes die Stoffzusammensetzung eines heute DIN EN 228 konformen E5 Ottokraftstoffes. Datenbasis bildet der in dieser Arbeit als Referenzkraftstoff herangezogene E5 Tankstellenbenzin KK01 (siehe Tabelle 13 in Kapitel 4).

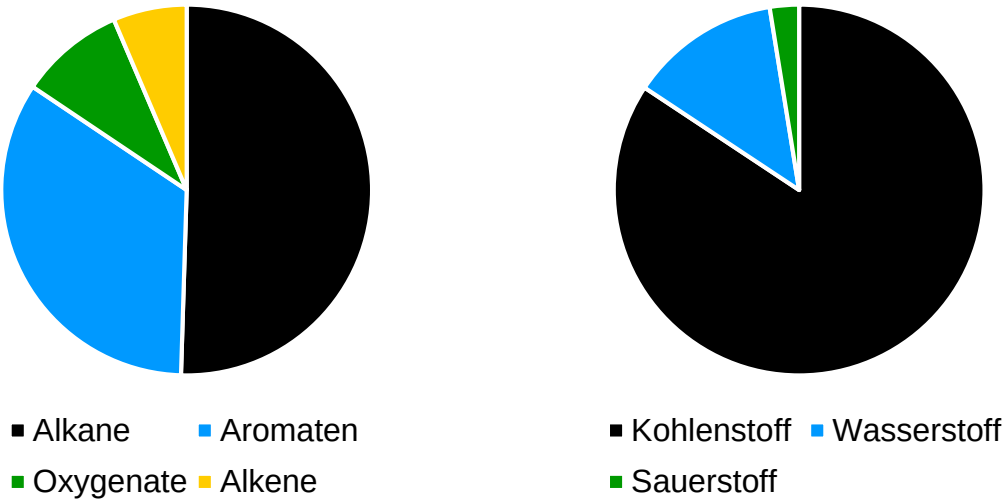


Abbildung 2-13: Stoffzusammensetzung eines DIN EN 228 konformen Benzins. (Datenbasis des untersuchten Referenzkraftstoffes KK01 aus Tabelle 13)

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

2.3 Reaktionskinetik der Kohlenwasserstoffe

2.3.1 Oxidationsprozess

Pauschal kann die Oxidation einer Kohlenwasserstoffkomponente C_xH_y durch die folgende Bruttoreaktionsgleichung in Gleichung 2-1 beschrieben werden [23]:

$$C_xH_y+\left(x+\frac{y}{4}\right)*O_2\rightarrow xCO_2+\frac{y}{2}H_2O+\Delta_RH \qquad \textbf{Gleichung 2-1}$$

Δ_RH stellt die Reaktionsenthalpie dar, welche der freigesetzten Wärme entspricht. Die Kohlenwasserstoffoxidation läuft im Allgemeinen jedoch nicht nach dem dargestellten Schema ab. Stattdessen besteht diese aus einer Vielzahl an Elementarreaktionen, wodurch sich die Kohlenwasserstoffverbrennung äußerst komplex gestaltet und bis heute nicht vollständig erforscht ist [21].

Die Vorgänge der motorischen Verbrennung sowie die ablaufenden Umwandlungsprozesse werden wesentlich von der Reaktionskinetik bestimmt. Sie gibt Aufschluss über den zeitlichen Ablauf der vorherrschenden chemischen Reaktionen. Mithilfe der zeitlichen Änderung, der an der Reaktion beteiligten Stoffe lässt sich eine Reaktionsgeschwindigkeit definieren, welche stark und nichtlinear von der Temperatur abhängig ist. Diese Abhängigkeit kann für viele Reaktionen mit guter Näherung durch den Arrhenius-Ansatz in Gleichung 2-2 beschrieben werden [8].

$$k=A*e^{-E_a/(R_m*T)} \qquad \textbf{Gleichung 2-2}$$

Der Faktor E_a bezeichnet die Aktivierungsenergie, R_m die allgemeine Gaskonstante, A den Stoßfaktor und T die Systemtemperatur. Die Aktivierungsenergie kommt im Wesentlichen einer Temperaturschwelle gleich. Gemäß der kinetischen Gastheorie hängt die Energie, welche ein Stoßpartner in eine Reaktion einbringt maßgeblich von dessen Geschwindigkeit ab, welche wiederum von dessen Temperatur bestimmt ist. Dementsprechend ist abzuleiten, dass hohe Aktivierungsenergien erst bei höheren Systemtemperaturen und niedrigere Aktivierungsenergien bereits bei geringeren Temperaturen überschritten werden können. Ausgehend von dieser Tatsache lassen sich bestimmte Reaktionspfade einzelnen Temperaturregimen zuordnen. Betreffend die Kohlenwasserstoffoxidation findet die Einteilung dieser Temperaturregime in zwei Bereiche statt, dem Niedertemperaturbereich und dem Hochtemperaturbereich [59], [60],

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[61], [62]. Zur Erläuterung der Interaktion beider Bereiche wird zusätzlich noch ein dritter Bereich definiert, der sogenannte Intermediärbereich.

Wie bereits erwähnt läuft der Oxidationsprozess über eine Vielzahl an Elementarreaktionen ab, jedoch lassen sich einzelne Reaktionsgruppen definieren, welche die Edukte und Produkte einer Elementarreaktion auf gemeinsame Merkmale reduziert [59], [63], [64].

1. Niedertemperaturbereich:

Nachfolgende Gleichung 2-3 stellt den dominierenden Reaktionspfad der Niedertemperaturoxidation dar.

$$RH \xrightarrow[+HO_2]{+\dot{O}H} \dot{R} \xrightarrow{+O_2} R\dot{O}O \rightarrow \dot{Q}OOH \xrightarrow{+O_2} \dot{O}OQOOH \rightarrow \ldots \rightarrow \text{Zerfallsprodukte} + 2\dot{O}H$$

Gleichung 2-3

Ausgehend von einem beliebigen Kohlenwasserstoff, aufgeteilt in Alkylrest und Wasserstoffatom, findet durch die Reaktion mit einem Radikal (Hydroxid, Wasserstoffperoxid, etc.) eine Abspaltung des dargestellten Wasserstoffatoms statt [59], [63]. Das daraus hervorgehende Alkylradikal bildet unter Anlagerung von molekularem Sauerstoff ein Alkylperoxid-Radikal. Dieses Molekül durchläuft eine interne Wasserstoffumlagerung, woraus ein Alkylhydroperoxid hervorgeht (das Produkt der Wasserstoffumlagerung/Isomerisation wird allgemein mit $\dot{Q}OOH$ bezeichnet) [59], [63]. Schließlich lagert sich erneut Sauerstoff an und weitere Zwischenschritte führen zum Zerfall des partiell oxidierten Kraftstoffes und zur Bildung von zwei Hydroxid-Radikalen. Der dargestellte kettenverzweigende Reaktionspfad benötigt ein äußerst reaktives Radikal, um die Reaktionskette zu initiieren und zwei weitere Radikale hervorzubringen [31], [65].

Kennzeichnend für diesen Reaktionspfad ist die mit steigender Systemtemperatur gemäß des Arrhenius-Ansatzes in Gleichung 2-2 exponentiell abnehmende Zündverzugszeit.

In Abbildung 2-14 ist der Temperaturverlauf einer im Niedertemperaturbereich simulierten Zündung am Beispiel von n-Heptan zu sehen. Nach 4 ms kommt es durch die eben beschriebene Reaktionskette und der damit einhergehenden Wärmefreisetzung zur Zündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

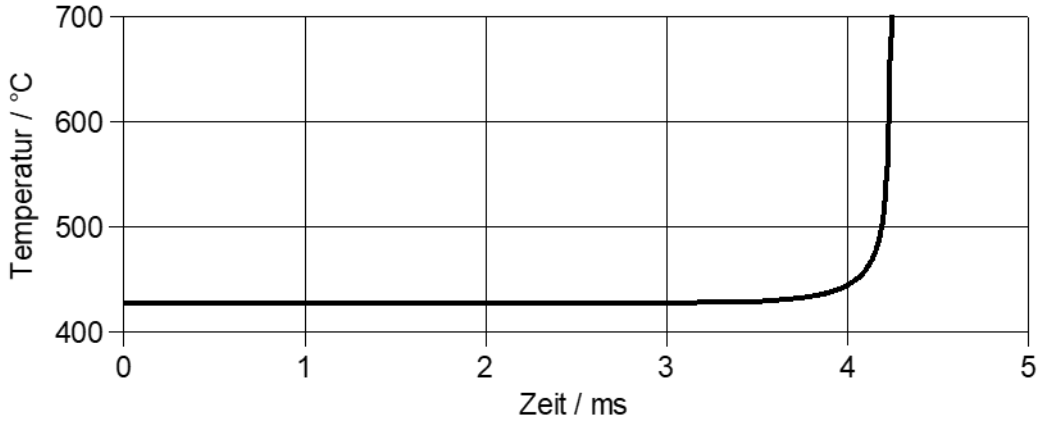
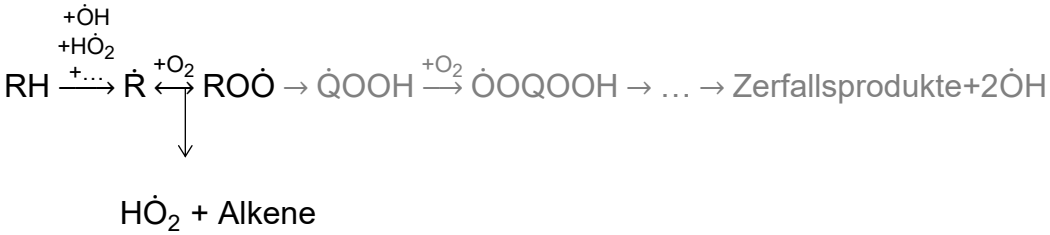


Abbildung 2-14: Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan-Luft-Gemisch bei 20 bar Systemdruck und 430 °C Systemtemperatur mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [7], [59].

2. Intermediärbereich:

Mit zunehmender Systemtemperatur konsumieren andere Reaktionen das Alkylperoxidradikal bzw. das Alkylhydroperoxidradikal und die interne Wasserstoffumlagerung wird zunehmend außer Kraft gesetzt. Diese kettenfortführenden Pfade führen insgesamt nicht zu einer Zunahme an Hydroxid-Radikalen und können letztendlich in einem Reaktionsabbruch resultieren. Dementsprechend hat der Intermediärtemperaturbereich eine entschleunigende Wirkung auf die Kettenreaktion. Gleichung 2-4 beschreibt den Reaktionspfad in diesem Oxidationsbereich [59], [62], [63], [66].



Gleichung 2-4

Abbildung 2-15 zeigt erneut am Beispiel eines n-Heptan-Luft-Gemisches den Temperaturverlauf der Zündung im Intermediärbereich der Oxidation. Zunächst kommt es infolge der Niedertemperaturoxidation zu einem ersten Anstieg der Temperatur bei 0,5 ms. Der anschließend reduzierte Temperaturgradient zwischen etwa 0,6 ms und 1,2 ms ist Resultat konkurrierender Reaktionen des Intermediärbereiches, welche durch den anfänglichen Temperaturanstieg dominant werden. Die dargestellte Charakteristik wird

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

als Zweistufenzündung bezeichnet und nicht mehr durch den Arrhenius-Ansatz in Gleichung 2-2 wiedergegeben [7].

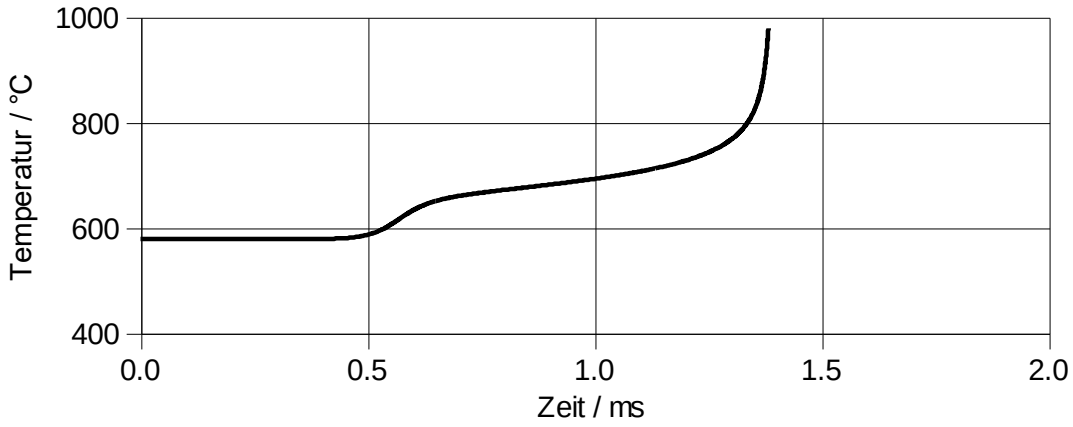
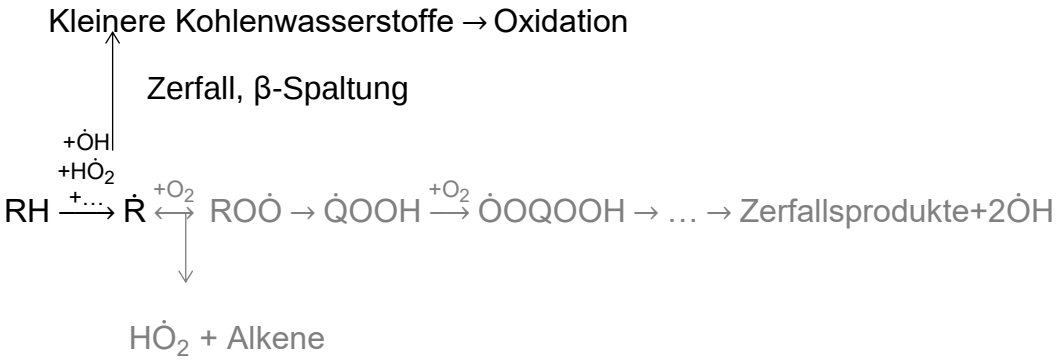


Abbildung 2-15: Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan-Luft-Gemisch bei 20 bar Systemdruck und 580 °C Systemtemperatur mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [7], [59].

3. Hochtemperaturbereich:

Mit zunehmender Temperatur gewinnen energetisch aufwendige Zerfallsreaktionen des Alkylradikals an Dominanz. Der β-Zerfall in kleinere Kohlenwasserstoffe und deren anschließende Oxidation, wie in Gleichung 2-5 dargestellt, dominieren den Kraftstoffumsatz [59], [62], [63], [66]



Gleichung 2-5

In Abbildung 2-16 ist der Temperaturverlauf der Hochtemperaturoxidation eines n-Heptan-Luft-Gemisches zu erkennen. Im Verlauf des Zündprozesses kommt es zu keiner Zweistufenzündung. Es liegen somit keine konkurrierenden Reaktionspfade mehr vor und die Zündung findet bei etwa 1 ms ohne erneute Entschleunigung statt. Auch im Hochtemperaturbereich findet gemäß dem Arrhenius-Ansatz mit steigender Temperatur eine exponentielle Reduktion der Zündverzugszeit statt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

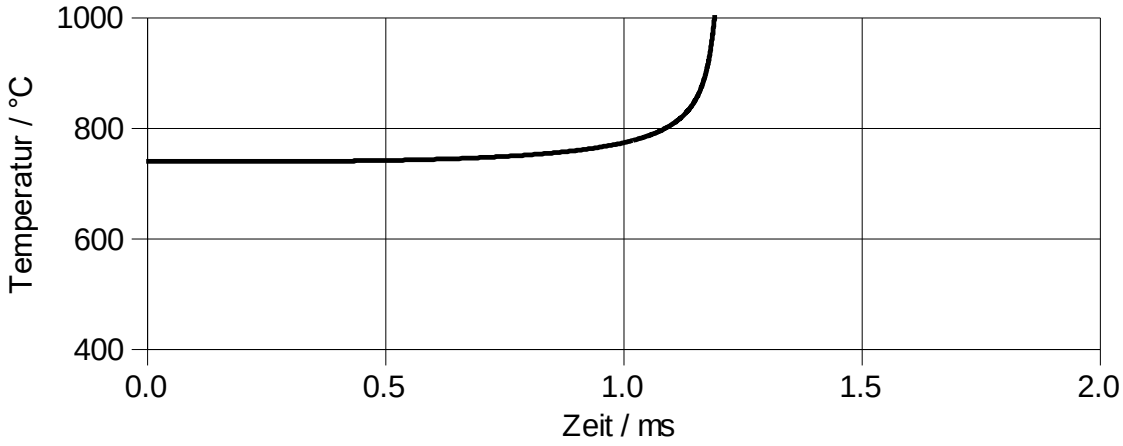


Abbildung 2-16: Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan-Luft-Gemisch bei 20 bar Systemdruck und 740 °C Systemtemperatur mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [7], [59].

Abschließend ist in Abbildung 2-17 die Einteilung der soeben diskutierten Reaktionsregime im Zündverzugszeitenverlauf von n-Heptan unter 20 bar Systemdruck dargestellt [7].

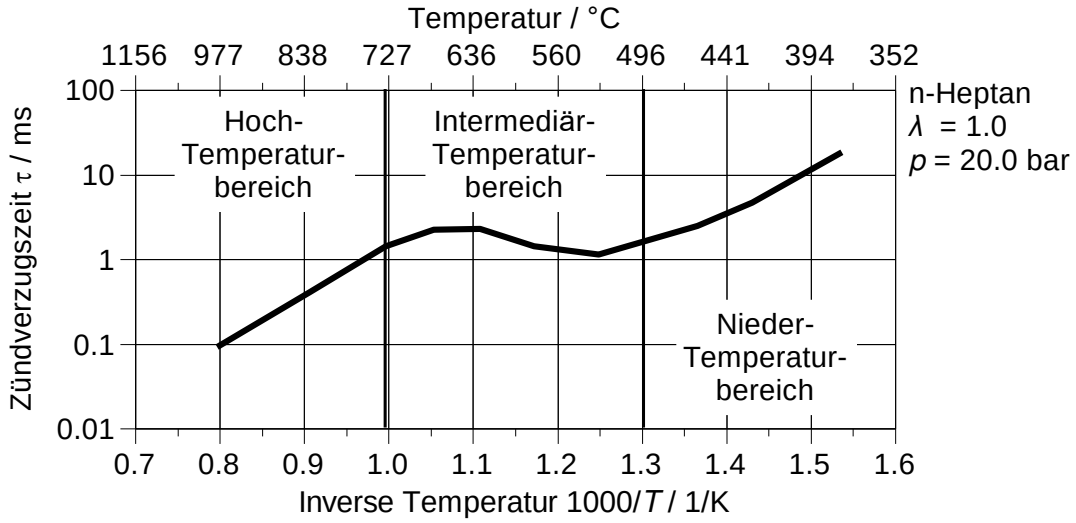


Abbildung 2-17: Simulierte Zündverzugszeiten für ein stöchiometrisches n-Heptan-Luft-Gemisch bei 20 bar Systemdruck mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [7], [59].

Im Bereich niedriger Temperatur sind kettenverzweigende Reaktionen dominant und die Zündverzugszeit nimmt exponentiell ab (Niedertemperaturoxidation).
Dem Niedertemperaturbereich folgt ab etwa 500 °C der Intermediärbereich und infolge der Dominanz von kettenfortführenden Pfaden gegenüber kettenverzweigender Pfade nimmt die Zündverzugszeit, abweichend vom Arrhenius-Ansatz, wieder zu (Intermediärtemperturoxidation). Aufgrund des **Vorzeichenwechsels der**

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Temperaturabhängigkeit wird dieses Verhalten als NTK-Charakteristik (Niedertemperaturkoeffizient) bezeichnet.

Ab zirka 730 °C kommt es aufgrund des nun dominierenden β-Zerfalls zum erneuten exponentiellen Abfall der Zündverzugszeit [7].

An dieser Stelle sei angemerkt, dass in [67] ebenso eine Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit von Isooktan beschrieben wird. So führt ein erhöhtes Druckniveau zur Reduktion der Signifikanz der NTK-Charakteristik; zu sehen in Abbildung 2-18.

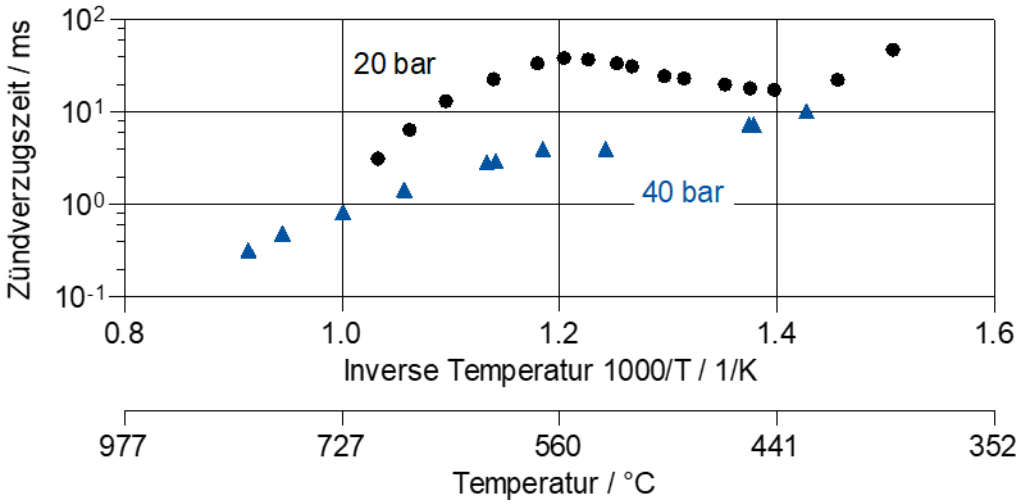


Abbildung 2-18: Druckeinfluss auf den Zündverzug bzw. die NTK-Charakteristik eines stöchiometrischen Isooktan-Luft-Gemisches [68].

2.3.2 Einfluss der Molekülstruktur

Wie bereits in Kapitel 2.2.1 aufgezeigt führt die abweichende Molekülstruktur der einzelnen Kohlenwasserstoffe zu signifikanten Differenzen in der Selbstzündungsneigung. Nachfolgend werden anhand komponentenspezifischer Zündverzugszeiten die Unterschiede in der Reaktivität detailliert analysiert. Die experimentell ermittelten Daten wurden aus der Literatur entnommen [69], [70], [71], [72], [73], [74], [75], [76].

Kohlenstoffkettenlänge

In Abbildung 2-19 wird mittels des unverzweigten C_4H_{10} n-Butans und des unverzweigten C_6H_{14} n-Hexans der Einfluss der Kohlenstoffkettenlänge erläutert. Je höher der Kurvenverlauf der Zündverzugszeit liegt, desto geringer ist die Selbstzündungsreaktivität des Moleküls.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

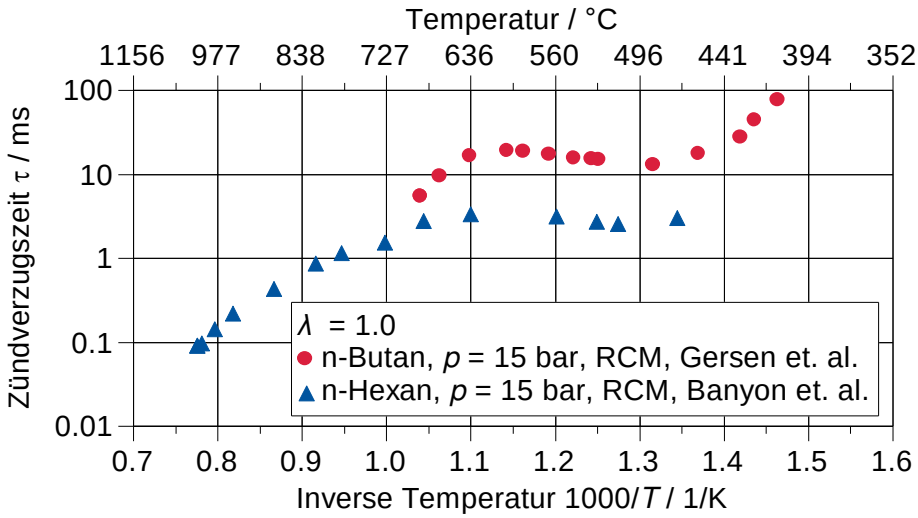


Abbildung 2-19: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Butan (C_4H_{10})-Luft- und n-Hexan (C_6H_{14})-Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) [7], [69], [70].

Im Allgemeinen steigt mit zunehmender Kettenlänge der Reaktivität des Moleküls im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich an [62], [69], [70], [77], [78], [79]. Dies liegt daran, dass die Kettenlänge die interne Wasserstoffumlagerung der Alkylperoxid-Radikale ($ROȮ \rightarrow ȮQOOH$) begünstigt und demzufolge Kettenverzweigungsreaktionen zunehmen [77], [80].

Kettenverzweigung

Das verzweigte C_6H_{14} Molekül Isohexan stellt ein Isomer des unverzweigten C_6H_{14} n-Hexans dar. Infolge der Kettenverzweigung wird die zweite interne Wasserstoffumlagerung ($ȮOQOOH \rightarrow \ldots \rightarrow$ Zerfallsprodukte+ $2ȮH$) des Alkylhydroperoxids erschwert. Dies hat unmittelbaren Einfluss auf die kettenverzweigenden Reaktionspfade wodurch eine reduzierte Reaktivität des Moleküls festzustellen ist; zu sehen in Abbildung 2-20 [81], [82], [83], [84].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

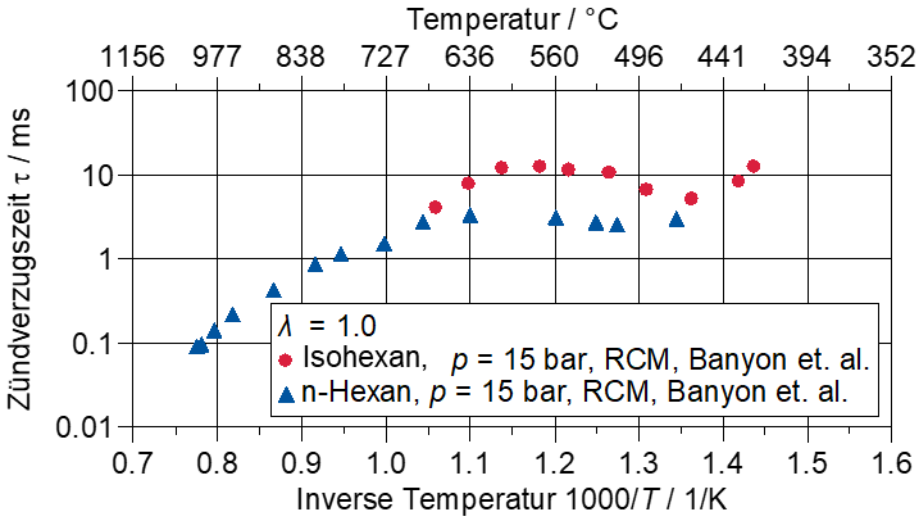


Abbildung 2-20: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan-Luft- und Isohexan-Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) [7], [69].

Doppelbindung

Grundsätzlich bedingt eine Doppelbindung eine schwächende Wirkung auf benachbarte Kohlenwasserstoffverbindungen. Im Nieder- bzw. Intermediärtemperaturbereich führt dies jedoch zur Bildung stabilerer Alkyl-Radikale und einer infolge reduzierten Reaktivität [71], [85], [86], [87]. Im Fall der Hochtemperaturoxidation resultiert die geschwächte Kohlenwasserstoffverbindung letztendlich in einer erhöhten Selbstzündungsneigung des Moleküls [72], [73]. Verdeutlicht wird dies in Abbildung 2-21 am Beispiel des gesättigten n-Hexans (C_6H_{14}) und des ungesättigten n-Hexens (C_6H_{12}). Im Bereich der Hochtemperaturoxidation laufen die gemessenen Zündverzugszeiten aufeinander zu. Im Niedertemperaturbereich hingegen sind einige Millisekunden Unterschied zwischen den Zündverzugszeiten der beiden Komponenten vorherrschend. Für die qualitative Betrachtung des Einflusses der Doppelbindung sind die Druckunterschiede der Messungen nicht von Relevanz. Dies ist vor allem daran zu erkennen, dass die Zündverzugszeiten von n-Hexan trotz der 6 bar Druckdifferenz im Bereich 0,8 inverser Temperatur im Diagramm deckungsgleich sind.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

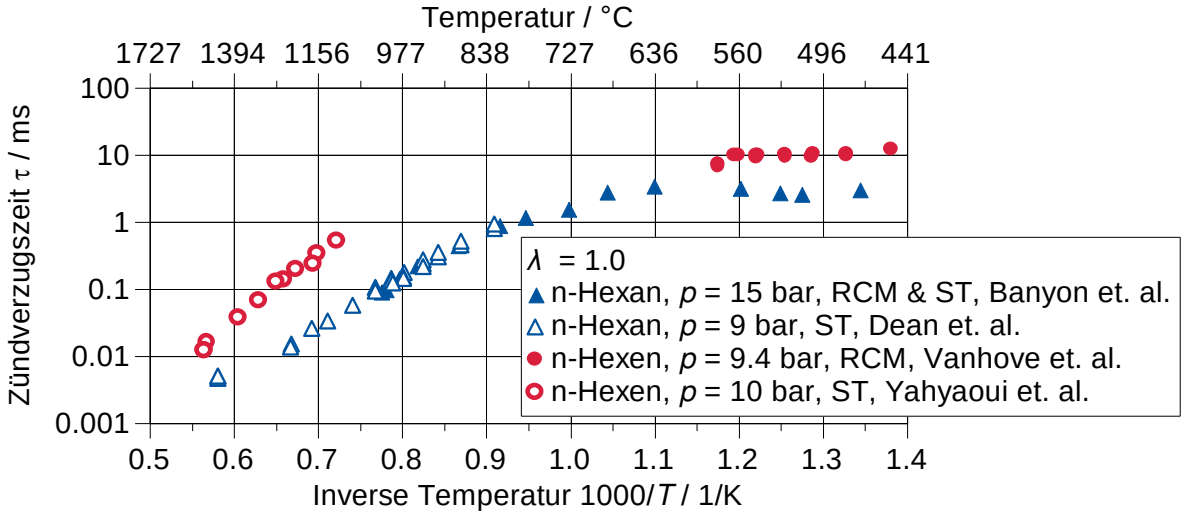


Abbildung 2-21: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan (C_6H_{14})-Luft- und n-Hexen (C_6H_{12})-Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9,4 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) und 9 bar bzw. 10 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [7], [69], [71], [72], [73].

Gesättigte Ringstruktur

Die gesättigte Ringstruktur führt analog der Kettenverzweigung im Nieder- und Intermediärbereich zu einer reduzierten Reaktionsrate der internen Wasserstoffumlagerung und verringert dementsprechend die Reaktivität. Abbildung 2-22 zeigt den Einfluss des gesättigten Kohlewasserstoffringes anhand von Cyclohexan (C_6H_{12}) gegenüber n-Hexan (C_6H_{14}).

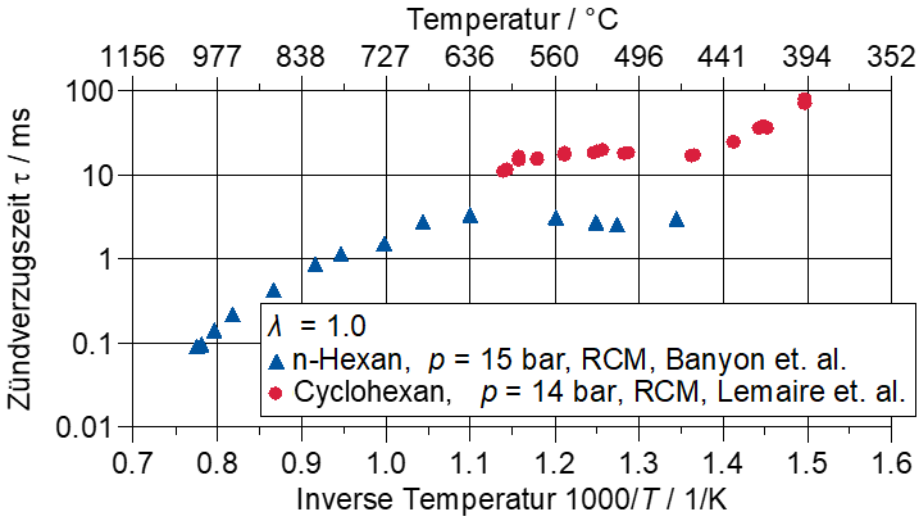


Abbildung 2-22: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan (C_6H_{14})-Luft- und Cyclohexan (C_6H_{12})-Luftäquivalent-Gemische bei 15 bar bzw. 14 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) [7], [69], [74].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Aromaten

Der ungesättigte Kohlenwasserstoffring von Toluol (C_7H_8) lässt in Abbildung 2-23 trotz deutlich höherem Systemdruck eine gegenüber n-Heptan (C_7H_{16}) reduzierte Reaktivität erkennen. Die Ursache dessen basiert auf zwei bereits beschriebenen Effekten. Zum einen bewirkt die Doppelbindung des Toluols eine Stabilisierung von Alkylradikalen, zum anderen behindert die Ringstruktur die interne Wasserstoffumlagerung [88], [89]. Diese Effekte resultieren in Summe in einer signifikant reduzierten Reaktivität, insbesondere im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich [79], [90], [91], [92].

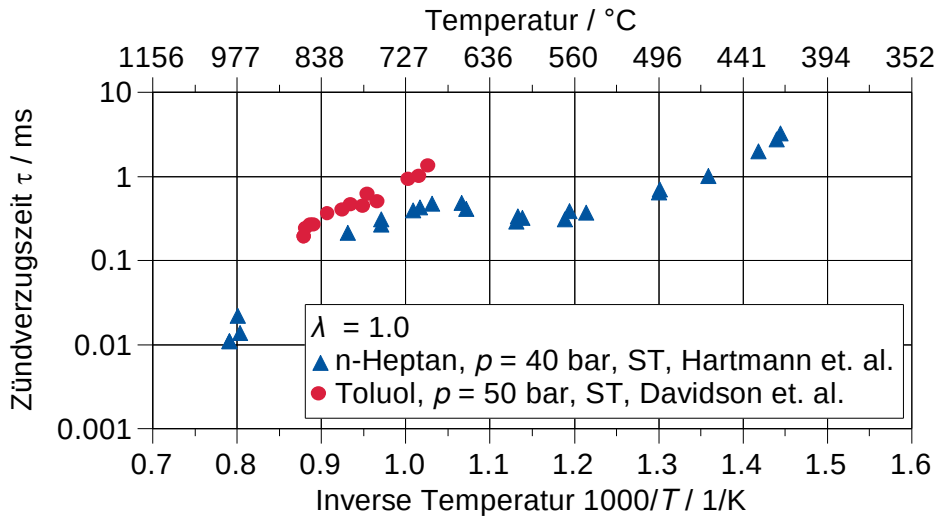


Abbildung 2-23: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Heptan (C_7H_{16})-Luft- und Toluol (C_7H_8)-Luft-Gemische bei 40 bar bzw. 50 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [7], [75], [93].

Alkohole

Die auf die Kohlenwasserstoffbindungen schwächende Wirkung der Hydroxy-Gruppe (OH-Gruppe) verursacht im Molekül eine erhöhte Wahrscheinlichkeit der initialen Wasserstoffabspaltung vom primären Kohlenstoffatom [64]. Der anschließende Reaktionsverlauf des Alkyl-Radikals führt größtenteils nicht zur Bildung von Alkylperoxy-Radikalen und unterbindet somit nachfolgende Kettenverzweigungsreaktionen im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich. Dementsprechend niedrig ist die Reaktivität des Alkohols in diesem Bereich, dargestellt in Abbildung 2-24 am Beispiel von 1-Hexanol ($C_6H_{13}OH$).

Im Fall der Hochtemperaturoxidation resultiert die schwächende Wirkung der Hydroxy-Gruppe in einer deutlich erhöhten Reaktivität. In Abbildung 2-24 lassen sich ab etwa 600 °C somit kürzere Zündverzugszeiten als n-Hexan feststellen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

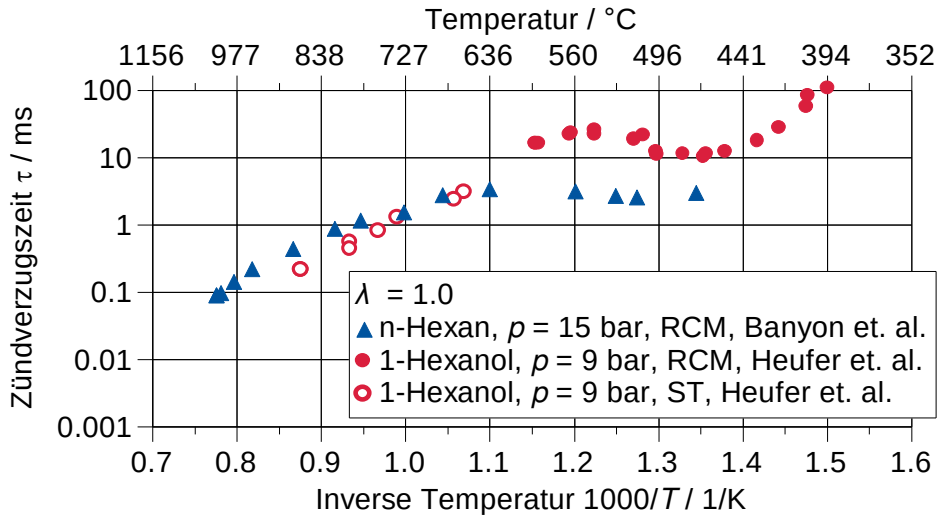


Abbildung 2-24: Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan (C_6H_{14})-Luft- und Hexanol ($C_6H_{13}OH$)-Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) und im Stoßwellenrohr [7], [69], [76].

Es kann festgehalten werden, dass die Molekülstruktur einen signifikanten Einfluss auf die Selbstzündungsneigung eines Kohlenwasserstoffes hat und die Selbstzündungsreihenfolge der jeweiligen Komponenten weder temperaturkonstant noch druckkonstant ist.

2.4 Normprüfverfahren zur Selbstzündungscharakterisierung von Ottokraftstoffen und deren Übertragbarkeit auf moderne Brennverfahren

Bereits in den 1930er Jahren wurden Methoden zur Bewertung des Selbstzündungsverhaltens von Kraftstoffen im Motorbetrieb entwickelt. Die daraus entstandenen Normprüfverfahren basieren bis heute auf einem nach dem Viertaktprinzip arbeitenden CFR-Einzylinder-Klopfprüfmotors (Cooperative-Fuel-Research). Das mit einem Vergaser betriebene Aggregat verfügt über eine stufenlos variable Verdichtung, welche ein Kompressionsverhältnis von 3 bis 30 ermöglicht. Das Verfahren der Research-Oktanzahl (ROZ) und jenes der Motor-Oktanzahl (MOZ) stellen bis heute, unter nur geringfügiger Modifizierung, die normgerechten Messmethoden zur Bestimmung des kraftstoffspezifischen Klopfverhaltens dar [94], [95]. Die Oktanzahl (OZ) beschreibt in diesem Zusammenhang als dimensionslose Größe die motorische Klopffestigkeit eines Kraftstoffes.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Abseits des Vergasers ist die Klopfdetektion mittels eines Membrandrucksensors (Pick-Up-Sensor) und dessen analoge Signalauswertung kennzeichnend für ein nicht mehr zeitgemäßes Prüfverfahren [96].

In Tabelle 3 wird ein Überblick der wesentlichen ROZ- bzw. MOZ-Betriebsrandbedingungen gegeben. Für detaillierte Informationen sei auf [97], [98], [99], [100] verwiesen.

Tabelle 3: Betriebsbedingungen der Normprüfverfahren ROZ [97], [100] und MOZ [98], [99].

Betriebsbedingungen	Einheit	ROZ	MOZ
Drehzahl	[U/min]	600	900
Ansauglufttemperatur	[°C]	52	38
Gemischvorwärmung	[°C]	-	149
Zündzeitpunkt	[°KWvZOT]	13	f(ε)
Verdichtungsverhältnis	[-]	variabel	variabel

Die Bestimmung der Oktanzahlen findet nach einer Eingabelungsmethode mit Vergleichskraftstoffen statt. Als Vergleichskraftstoffe dienen definierte volumetrische Mischungen aus klopffestem Isooktan C_8H_{18} und klopffreudigem n-Heptan C_7H_{10}, sogenannte PRF-Gemische (Primary Reference Fuel). Per Definition wird sowohl bei der ROZ- als auch der MOZ-Methodik dem Isooktan eine OZ von 100 und n-Heptan eine OZ von 0 zugewiesen. Die Oktanzahl der PRF-Gemische wird durch den volumetrischen Anteil von Isooktan wiedergegeben. Exemplarisch sei ein PRF95 mit 95 % vol. Isooktan und einer OZ von 95 erwähnt. Werden Kraftstoffe mit einer Klopffestigkeit größer 100 gemessen, kommen PRF-Gemische mit Tetraethylblei-Beimengung zum Einsatz [23], [95], [97], [98], [99], [100].

Die Messmethoden ROZ und MOZ, sehen vor, dass unter konstantem Verdichtungsverhältnis ein PRF geringerer Klopffestigkeit sowie ein PRF höherer Klopffestigkeit als jene der unbekannten Probe, zur Eingabelung dienen. Anschließend erfolgt anhand einer Interpolation, unter Berücksichtigung der gemessenen Klopfintensitäten der Vergleichskraftstoffe, die OZ-Bestimmung der zu untersuchenden Probe. Die zur Bestimmung der Oktanzahl gewählten PRFs unterscheiden sich hierbei nur um eine OZ. Zum Beispiel werden ein PRF95 und ein PRF96 als Vergleichskraftstoffe für Proben mit einer ROZ von 95,X herangezogen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Grundsätzliches Ziel bei der Entwicklung des MOZ-Verfahrens war es, das Verhalten thermisch hoch beanspruchter Motoren abzubilden. Aus diesem Grund ist sowohl Drehzahl als auch Gemischtemperatur höher als bei der ROZ-Methodik. Naturgemäß zeigen Ottokraftstoffe infolge der thermodynamischen Unterschiede der Bewertungsverfahren eine geringere MOZ als ROZ. Die als Sensitivität S bezeichnete Differenz der Oktanzahlen (Gleichung 2-6) ist somit ein Maß der Temperaturabhängigkeit des kraftstoffspezifischen Selbstzündungsverhaltens und liegt bei konventionellen Ottokraftstoffen in etwa zwischen 8-10 OZ [23], [30], [101]. An dieser Stelle sei angemerkt, dass PRFs per Definition keine Sensitivität aufweisen.

$$S = ROZ - MOZ \qquad \textbf{Gleichung 2-6}$$

S…Sensitivität

Inwiefern die Klopfbewertung auf Basis der normgerechten Methoden nun Gültigkeit in Bezug auf moderne Ottomotoren hat, wird im Folgenden betrachtet. Einleitend ist in Abbildung 2-25 die Entwicklung der Leistungsdichte von Ottomotoren der letzten 30 Jahre aufgezeigt.

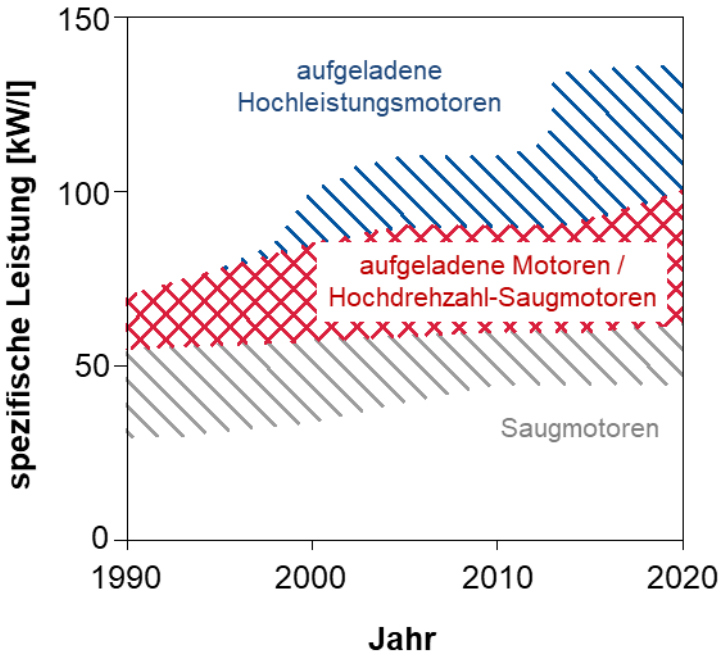


Abbildung 2-25: Entwicklung der Leistungsdichte von Ottomotoren seit 1990 [102] (angepasste Darstellung).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

K-Faktor

Wie bereits in Kapitel 2.3 erwähnt ist die Selbstzündungsneigung der Kraftstoffe stark von den thermodynamischen Randbedingungen im Brennraum abhängig. Unter Berücksichtigung der steigenden spezifischen Leistung moderner Ottomotoren ist davon auszugehen, dass die thermodynamischen Brennraumbedingungen dieser im Vergleich zu jenen Bedingungen von Motoren aus den 1930er Jahren signifikant abweichen. Dementsprechend ist die Verwendung der normgerechten ROZ und MOZ zu hinterfragen.

Eine Vielzahl an Untersuchungen der letzten Jahrzehnte ist eben dieser Fragestellung nachgegangen und kam zur Erkenntnis, dass weder ROZ noch MOZ eine hinreichend genaue Klopfcharakterisierung der Kraftstoffe im Betrieb moderner Motoren zulässt. [5], [6], [27], [103], [104], [105], [106], [107], [108], [109], [110], [111].

Um die Relevanz der Kraftstoffkennzahlen im modernen Motorbetrieb zu analysieren, wurde in [5] eine empirische Methodik vorgestellt, welche mittels eines multiplen linearen Ansatzes einen Zusammenhang des kraftstoffspezifischen Klopfverhaltens und der normgerechten Oktanzahlen zulässt. Der als Oktanindex (OI) bezeichnete Kennwert beschreibt das betriebspunktabhängige Selbstzündungsverhalten des Kraftstoffes anhand einer betriebspunktabhängigen Gewichtung seiner ROZ und MOZ. Konkret heißt dies, dass ein Benzin je nach Betriebspunkt eine unterschiedliche Reaktivität aufweist und diese nur bedingt auf dessen ROZ oder MOZ reduziert werden kann. So besteht die Möglichkeit, dass ein ROZ95-Kraftstoff in gewissen Kennfeldbereichen des Motors eine ähnliche Reaktivität bzw. Klopfneigung zeigt wie ein vermeintlich klopfresistenterer ROZ97-Kraftstoff. Die Ursache dessen liegt im Unterschied der Sensitivitäten (Differenz ROZ zu MOZ) begründet und wird anschließend detailliert erläutert.

Der OI ist somit als berechnete Oktanzahl zu verstehen und gibt die unter den gegebenen Randbedingungen vorhandene Klopffestigkeit des Kraftstoffes im Betrieb eines modernen Motors wieder (Gleichung 2-7 bzw. Gleichung 2-8). Basis der Berechnung bilden die ROZ und MOZ sowie der Gewichtungsfaktor K, welcher empirisch durch umfangreiche Messungen ermittelt wird. Bezüglich der Details zur Ermittlung des K-Faktors sei auf [5] verwiesen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

$$OI = ROZ - K * (ROZ - MOZ) \quad \textbf{Gleichung 2-7}$$

$$OI = ROZ - K * S \quad \textbf{Gleichung 2-8}$$

OI…Oktanindex
K…K-Faktor (betriebspunktabhängige Konstante)
S…Sensitivität (ROZ - MOZ)

Der Parameter K beschreibt in obiger Gleichung einen Gewichtungsfaktor der Kraftstoffsensitivität und stellt eine kraftstoffunabhängige Größe dar, welche von der Druck- und Temperaturhistorie des Gemisches abhängig ist. Diese Abhängigkeit resultiert in einer betriebspunkt- bzw. motorabhängigen Variabilität des Parameters. In weiterer Folge führt diese dazu, dass ein Benzin je nach Betriebsrandbedingungen einen unterschiedlichen OI besitzt. So entspricht die ROZ (K = 0) bzw. die MOZ (K = 1,0) jeweils nur in einem bestimmten Motorbetriebspunkt exakt dem OI des Kraftstoffes. Solange 0 < K < 1 ist, bewegt sich der OI innerhalb seiner ROZ und MOZ Werte und das tatsächliche motorische Klopfverhalten des Ottokraftstoffes bewegt sich innerhalb seiner mittels ROZ und MOZ angegebenen Grenzen [5].

Hinsichtlich der Kraftstoffunabhängigkeit der Methodik zeigen Analysen in [110], [112], dass infolge hoher Ladedrücke (≥ 1,4 bar absolut) die angenommene Linearität in Gleichung 2-7 bzw. Gleichung 2-8 nicht mehr zutreffend ist und ein quadratischer Ansatz notwendig wird. Des Weiteren wird in [107] auf Basis von HCCI Messungen festgestellt, dass mit zunehmender internen Abgasrückführung (AGR) ebenso die lineare Übertragbarkeit abnimmt. Diese Ergebnisse lassen ableiten, dass unter bestimmten Betriebsbedingungen offensichtlich doch eine Kraftstoffabhängigkeit von K vorliegt.

Abseits dieser Thematik sind bei heutigen Motoren nicht ausschließlich positive K-Werte zu beobachten. Untersuchungen in [5], [27], [103], [110], [112] zeigen, dass im Fall moderner Motoren der Parameter K in großen Kennfeldbereichen ebenfalls negative Werte (bis zu K < -1,0) annimmt. Diese Tatsache lässt erkennen, dass eine hohe ROZ bzw. MOZ nicht notwendigerweise zu einer höheren Klopfresistenz im Motorbetrieb führt und demzufolge das Kraftstoffverhalten nicht mehr mittels der genormten Oktanzahlen ableitbar ist. Zur Erläuterung dessen wird exemplarisch der Betrieb zweier Kraftstoffe gleicher ROZ aber unterschiedlicher MOZ in einem Betriebspunkt mit K = -0,5 beschrieben. In Gleichung 2-9 und Gleichung 2-10 ist die Berechnung des kraftstoffspezifischen Oktanindex (OI) zu sehen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Betriebspunkt: **K = -0,5**

Kraftstoff a: **ROZ95, MOZ85**
Sensitivität S = ROZ - MOZ = 95 - 85 = **10**

$\mathbf{OI_a}$ = ROZ - K * S = 95 - (-0,5) * 10 = **100** **Gleichung 2-9**

Kraftstoff b: **ROZ95, MOZ90**
Sensitivität S = ROZ - MOZ = 95 - 90 = **5**

$\mathbf{OI_b}$ = ROZ - K * S = 95 - (-0,5) * 5 = **97,5** **Gleichung 2-10**

Es ist festzustellen, dass in einem Betriebspunkt mit negativem K-Faktor jener Kraftstoff höherer Sensitivität (Kraftstoff a in Gleichung 2-9) einen höheren Oktanindex (OI_a = 100) besitzt. Bei negativen K-Faktoren zeigen sich somit Kraftstoffe mit zunehmender Sensitivität (geringerer MOZ) als klopffester. Demgegenüber gewinnt mit positiven K-Faktor die MOZ an Relevanz und eine geringere Sensitivität (hohe MOZ) resultiert in einem höheren OI.

Die Ursache des wechselnden Verhaltens wird folgend beschrieben [5], [113], [114]:

Als Referenzkraftstoffe der ROZ- und MOZ-Methodik werden die n-Paraffine Isooktan und n-Heptan (PRF-Kraftstoffe) herangezogen. [101] zeigt auf, dass eben diese im Bereich niedriger Drücke einen ausgeprägten Niedertemperaturkoeffizienten (NTK-Verhalten) haben und infolgedessen deren Reaktivität äußerst temperatursensitiv ist. Wie bereits in Kapitel 2.3.1 erwähnt, führt das NTK-Verhalten in einem gewissen Temperaturbereich zu degenerierten Kettenverzweigungsreaktionen, welche mit zunehmender Temperatur, wider Erwarten in einer reduzierten anstatt gesteigerten Reaktivität resultieren (siehe Abbildung 2-17). Da nun Ottokraftstoffe unter anderem aus Aromaten bzw. Olefinen bestehen, welche kein NTK-Verhalten zeigen [101] besitzen diese einen weniger stark ausgeprägten Niedertemperaturkoeffizienten als die PRF-Gemische. Eben dies führt jedoch dazu, dass Benzine speziell im NTK-relevanten Temperaturbereich ein zu den PRF-Referenzkraftstoffen deutlich abweichendes Zündverhalten haben.

[114] erklärt die daraus resultierende Problematik anhand berechneter Zündverzugszeiten der NTK-behafteten Referenzkraftstoffe PRF85, PRF95 und einer Toluol-Isooktan-n-Heptan-Mischung ohne NTK-Charakteristik (siehe Abbildung 2-26). Der 3-Komponenten-Kraftstoff beschreibt mit einer ROZ95 und einer MOZ85, ein Benzinäquivalent hoher Sensitivität.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

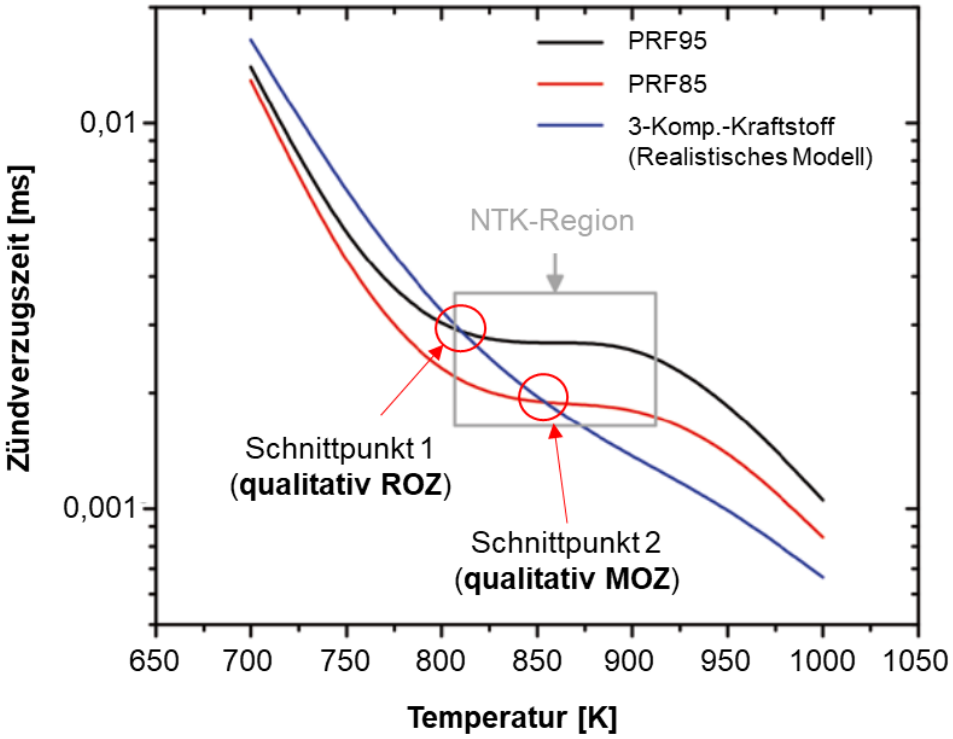


Abbildung 2-26: Vergleich berechneter Zündverzugszeiten eines PRF85 und PRF95 sowie eines Toluol-Isooktan-n-Heptan-Gemisches (ROZ95, MOZ85) [114] (geänderte Darstellung).

Die Schnittpunkte der Zündverzugszeitkurven in Abbildung 2-26 repräsentieren qualitativ die Betriebsbedingungen des ROZ- und MOZ-Verfahrens. So lässt bei geringerer Temperatur der PRF95 die gleiche Reaktivität wie der 3-Komponenten-Kraftstoff (ROZ95) erkennen (Schnittpunkt 1), wogegen mit zunehmender Temperatur dies wechselt und der PRF85 dieselbe Reaktivität wie der 3-Komponenten-Kraftstoff (MOZ85) aufweist (Schnittpunkt 2). Schlussfolgernd bedeutet dies, dass durch das ausgeprägte NTK-Verhalten der PRFs, diese im Bereich höherer Temperaturen (Schnittpunkt 2) ein unkritischeres Verhalten in Relation zu Kraftstoffen geringerer NTK-Ausprägung haben als es bei niedrigen Temperaturen (Schnittpunkt 1) der Fall ist. Eben diese Tatsache ist Ursache der Sensitivität (Differenz von ROZ und MOZ) von Ottokraftstoffen [101], [114]. Die zuvor erwähnte Problematik ist letztendlich jene, dass idealisiert betrachtet die Sensitivität die Steigung der Geraden des 3-Komponenten-Kraftstoffes wiedergibt. Ein Kraftstoff gleicher ROZ aber höherer MOZ (geringere Sensitivität) würde in einem flacheren Kurvenverlauf resultieren, welcher zu einer erhöhten Reaktivität bei niedrigen Temperaturen führt (3-Komponenten-Kraftstoff-Kurve dreht um Schnittpunkt 1 gegen den Uhrzeigersinn). Arbeitet ein moderner Ottomotor in ebensolchem Temperaturbereich so

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

wäre infolge ein Kraftstoff hoher Sensitivität und somit geringer MOZ von wirkungsgradtechnischem Vorteil.

In [113] wird eben dies anhand von Simulationen bestätigt. Mit abnehmender Sensitivität (hohe MOZ) ist eine Zunahme der Reaktivität bei Temperaturen unterhalb jener der ROZ-Bedingungen zu beobachten. Demgegenüber wird auf Basis der reaktionskinetischen Berechnungen festgestellt, dass mit steigender Sensitivität (geringe MOZ) wiederum im Hochtemperaturbereich die Reaktivität der Kraftstoffe ansteigt.

In Abbildung 2-27 wird ersichtlich inwiefern diese Thematik nun von Relevanz ist. In der Darstellung sind die Endgastemperaturbereiche von Turbomotoren bzw. Saugmotoren jenen Temperaturen des ROZ- und des MOZ-Verfahrens gegenübergestellt. Im Fall des CFR-Motors entsprechen die Temperaturen den Bedingungen während einer ROZ96- bzw. MOZ96-Messung. Die Darstellung illustriert das deutlich geringere Temperaturniveau moderner Motoren gegenüber jenem des CFR-Aggregates.

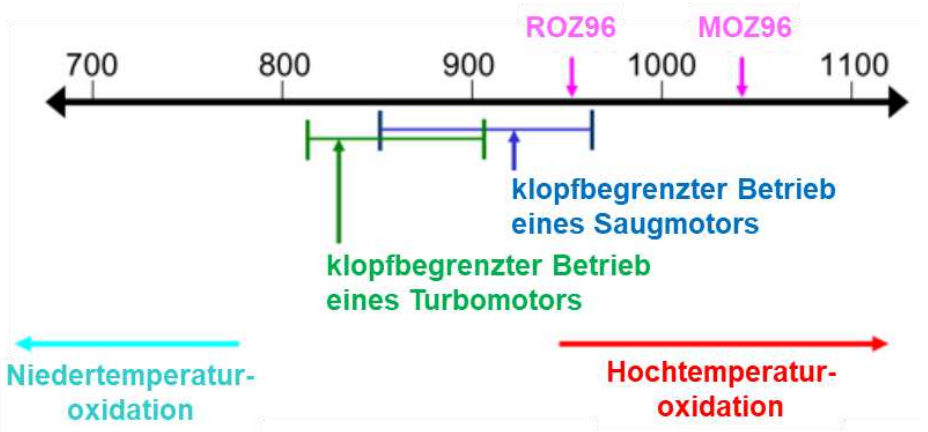


Abbildung 2-27: Berechnete Endgastemperaturen im klopfbegrenzten Betriebsbereich von Turbomotoren, Saugmotoren und dem CFR-Motor unter ROZ96 bzw. MOZ96 Betriebsbedingungen [113] (angepasste Darstellung).

Infolge der deutlich geringen Endgastemperatur moderner Motoren kommt der eben beschriebene Effekt zum Tragen, dass Kraftstoffe hoher Sensitivität im Realbetrieb klopfresistenter sind als jene Benzine geringerer Sensitivität bzw. höherer MOZ. In [5], [27] wird dies anhand umfassender experimenteller Versuche bestätigt. Rückblickend auf den Oktanindex (OI) (Gleichung 2-9 bzw. Gleichung 2-10) ist damit ein negativer K-Faktor bei den Betriebspunkten der untersuchten Versuchsträger vorherrschend.

Ziel der heutigen Motorenentwicklung ist es Aggregate hoher spezifischer Leistung unter reduzierter Klopfneigung zu entwickeln. Dementsprechend sind höhere Drücke unter reduzierten Brennraumtemperaturen das Entwicklungsziel moderner Motoren. Dies führt im Umkehrschluss dazu, dass sich die Betriebsrandbedingungen zukünftiger Motoren

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

weiter von jenen der MOZ als auch ROZ entfernen und die genormten Messmethoden nicht mehr repräsentativ sind. [115] unterstreicht diese Tatsache anhand einer Studie der Entwicklung des K-Faktors auf Basis statistischer Messungen zwischen 1951-1991. Bereits 1951 war mit einem durchschnittlichen K-Faktor < 0,5 der Anti Knock Index (AKI) als Mittel der ROZ und MOZ nicht mehr zeitgemäß. In den darauffolgenden Jahren fiel der K-Wert von durchschnittlich 0,33 (1951) auf 0,09 (1991). 45% der in dieser Studie untersuchten Tests im Jahr 1991 hatten bereits einen negativen K-Faktor. Als Hauptursache des seit 1951 stetig fallenden K-Wertes werden die sukzessiv verbesserte Motorkühlung, die Luftführung (4-Ventil-Technik, Aufladung, Ladeluftkühlung) sowie die Direkteinspritzung genannt.

Bezüglich des Oktanindex OI ist nun folgendes festzuhalten [5]:

- Empirisch ermittelte Methodik zur Berechnung des kraftstoffspezifischen Klopfverhaltens in modernen Motoren.
- Entspricht einer auf Basis von ROZ und MOZ berechneten Oktanzahl.

$$OI = ROZ - K * (ROZ - MOZ)$$

$$OI = ROZ - K * S$$

OI…Oktanindex
K…K-Faktor (betriebspunktabhängige Konstante)
S…Sensitivität

- Der Faktor K stellt hierbei eine kraftstoffunabhängige Größe dar, welche von den thermodynamischen Randbedingungen (Betriebspunkt) abhängig ist und den Einfluss der Sensitivität S des Kraftstoffes gewichtet.
- Der OI ist somit ein im Betriebskennfeld sowie über unterschiedliche Motoren variabler Parameter.
- K-Werte heutiger Motoren sind in weiten Kennfeldbereichen negativ, wodurch Kraftstoffe hoher Sensitivität von verbrennungstechnischem Vorteil sind.
- **Ursache des negativen K-Faktors und der damit einhergehenden unzureichenden Klopfbewertung mittels ROZ und MOZ sind**:
  - **Abweichende Brennraumbedingungen** moderner Motoren von jenen des CFR-Prüfmotors bei Ermittlung der ROZ und MOZ.
  - Die Verwendung der Paraffine Isooktan und n-Heptan als **PRF-Referenzkraftstoffe** der ROZ- bzw. MOZ-Bestimmung. **Das ausgeprägte NTK-Verhalten dieser Paraffine** ist **nicht repräsentativ für** die Bewertung **realer Ottokraftstoffe** geringerer NTK-Charakteristik.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Klopfcharakterisierung von Kraftstoffen hohen Oxygenat-Anteiles

Abseits der komplexen Thematik des NTK-Verhaltens der PRF-Referenzkraftstoffe führen hoch oxygenathaltige Kraftstoffe zu einer generellen Einschränkung der ROZ- und MOZ-Methodik [116], [117]. In [6] wird auf Basis umfangreicher optischer Analysen des Gemischbildungsprozesses im Vergaser des CFR-Motors nachgewiesen, dass speziell beim ROZ-Verfahren, aufgrund der fehlenden Gemischaufheizung, eine signifikante Benetzung der Saugrohrwand stattfindet. Je nach Siedeverhalten des Kraftstoffes kommt es infolgedessen zu einer undefinierten Menge an Kraftstoffverdampfung sowie Eintritt von Flüssiganteilen in den Brennraum. Wie aus der Literatur bekannt besitzen Alkohole wie etwa Ethanol und Methanol eine deutlich höhere Verdampfungsenthalpie als konventionelle Ottokraftstoffe. Im Fall von Ethanol ist die Verdampfungswärme etwa 2,5-mal höher als jene von Benzin [118]. Dies führt dazu, dass die Kraftstoffverdampfung im Brennraum in einer deutlichen Reduktion der Klopfneigung resultiert (Innenkühleffekt). Tritt nicht der gesamte Kraftstoff flüssig in den Brennraum ein, so ist das klopfreduzierende Potenzial des Alkohols nicht vollständig abgebildet.

Im Fall der MOZ bewirkt eine Gemischvorwärmung auf 149 °C eine weitestgehend vollständige Verdampfung des Kraftstoffes im Saugrohr, wodurch der Benefit der Verdampfungsenthalpie nicht berücksichtigt wird. Eine Charakterisierung des Klopfverhaltens alkoholhaltiger Kraftstoffe im Betrieb moderner DE-Motoren anhand der MOZ ist dadurch in Frage zu stellen [6].

Bereits in der ASTM D2699 [97] bzw. D2700 [98] wird darauf hingewiesen, dass eine **Charakterisierung von Kraftstoffen mit hohem Oxygenaten-Gehalt auf Basis der ROZ und der MOZ nicht empfohlen** wird. Die DIN EN ISO 5163 [99] bzw. 5164 [100] gibt hierbei einen konkreten Wert von > 4 % (m/m) Oxygenaten an, was einem Ethanol-Gehalt von 11 % vol. und einem Methanol-Gehalt von 8 % vol. gleichkommt. Notwendige Anpassungen zur ROZ- und MOZ-Bestimmung oxygenathaltiger Kraftstoffe werden in DIN 51756-7 [119] angegeben. Diese beinhalten jedoch lediglich den Tausch der Vergaserdüsen, um den erhöhten volumetrischen Kraftstoffbedarf von Alkoholen sicherzustellen sowie eine zusätzliche Gemischvorheizung zur Kompensation des hohen Kühleffektes der Kraftstoffverdampfung im Saugrohr der MOZ-Messung.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Zusammengefasst sind folgende Ursachen Grund einer unzureichenden Bewertung von Kraftstoffen hohen Oxygenat-Anteiles [1], [6]:

- **Vergaserbetrieb** des CFR-Motors resultiert in einer signifikanten Wandbenetzung im Saugrohr des ROZ-Verfahrens. Infolge kommt es zu einem undefinierten Eintritt von Flüssiganteilen des Kraftstoffes in den Brennraum.
- Durch die **Gemischvorwärmung** der MOZ-Methodik wird die hohe Verdampfungsenthalpie der Oxygenate nicht berücksichtigt.

In [1], [6] wird die Adaption einer Direkteinspritzung vorgenommen, um die Verdampfungsenthalpie der Kraftstoffe korrekt abzubilden. Dieses Aggregat ist Basis der Untersuchung der vorliegenden Dissertation.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

3 Experimentelle Versuchsträger und Methodik

Teile dieser Dissertation entstanden im Zuge eines kooperativen Forschungsvorhabens der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University sowie der Juniorprofessur für physikalisch-chemische Grundlagen der Verbrennung (PCFC) der RWTH Aachen University [7].

Aufgrund der Komplexität des Forschungsprojektes umfasst dieses zahlreiche Versuchsträger für experimentelle und numerische Arbeiten.

Am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der TU Wien wurden experimentelle Untersuchungen, thermodynamische Analysen und die Entwicklung potenzieller Kraftstoffkennzahlen am CFR-Prüfmotor sowie deren Validierung an einem Dreizylinder-Serienaggregat durchgeführt. Diese sind der Kern der vorliegenden wissenschaftlichen Arbeit.

Abseits der Untersuchungen am IFA der TU Wien wurden zusätzlich aus der Zusammenarbeit gewonnene Analysedaten der RWTH Aachen University genutzt. Diese umfassen zum einen reaktionskinetische Fundamentalanalysen des PCFC an einem Einhubtriebwerk/RCM (Rapid Compression Machine) und zum anderen simulativ gestützte experimentelle Analysen des VKA an einem Einzylinder-Forschungsmotor.

In den folgenden Kapiteln wird lediglich auf die am IFA der TU Wien untersuchten Versuchsträger detailliert eingegangen. Für genauere Informationen betreffend die Versuchsträger der RWTH Aachen sei auf [7] verwiesen.

3.1 Einhubtriebwerk/RCM (Rapid Compression Machine)

Zur Analyse und Identifikation der im Motorbetrieb selbstzündungsrelevanten Zündregime des Kraftstoffoxidationsprozesses wurden umfassende Untersuchungen an einem Einhubtriebwerk vorgenommen. Das Luft-Kraftstoff-Gemisch wird in dieser Versuchsanordnung unter Ausschluss etwaiger motorischer Quereinflüsse qualitativ beschrieben und weiterführend zum Abgleich reaktionskinetischer Modelle herangezogen. Die Daten ermöglichen im Folgeschritt numerische Analysen der Vorentflammung. Details zur Numerik sind in Kapitel 3.2 bzw. Kapitel 3.3 von [7] zu entnehmen.

Nachfolgend werden die Funktionsweise sowie die Auswertemethodik einer RCM beschrieben. Für detaillierte Informationen ist in Kapitel 5.1 von [7] nachzulesen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Das Einhubtriebwerk dient der Analyse kraftstoffspezifischer Zündverzugszeiten unter definierten thermodynamischen Randbedingungen. Das Experiment sieht die Homogenisierung des Luft-Kraftstoff-Gemisches in einem unter geringem Druck und Temperatur befindlichen externen Behälter vor. Nach ausreichend langer Verweilzeit wird das homogene Gemisch in eine Reaktionskammer übergeleitet. Ein schnelllaufender Kolben komprimiert anschließend in etwa 15-20 ms das Gemisch auf einen definiert einstellbaren Kompressionsenddruck und eine definiert einstellbare Kompressionsendtemperatur. Infolge der Druck- bzw. Temperaturerhöhung kommt es in der Reaktionskammer nach gewisser Zeit zur Selbstzündung der Probe, gekennzeichnet durch einen steilen Druckgradienten. Die **Zeitspanne zwischen Kompressionsende und Zündung stellt hierbei die zu ermittelnde Zündverzugszeit** dar. Abbildung 3-1 zeigt exemplarisch den Druckverlauf zur Analyse der Zündverzugszeit einer RCM Messung.

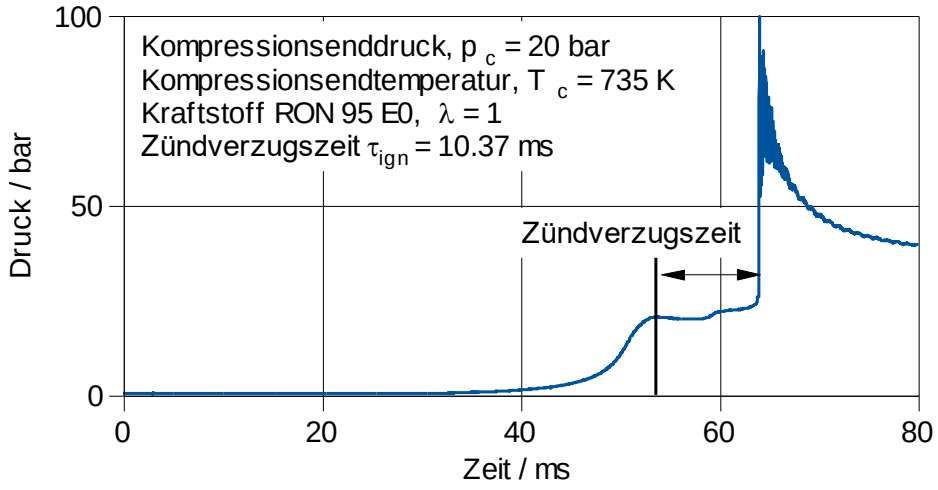


Abbildung 3-1: Zündverzugszeitanalyse auf Basis des Brennkammerdruckverlaufes einer RCM Messung [7].

Anhand der Darstellung ist innerhalb der Zündverzugszeit bei etwa 60 ms zunächst ein leichter Druckanstieg (1. Zündstufe der Oxidation) zu erkennen bevor es zur vollständigen Umsetzung des Luft-Kraftstoff-Gemisches kommt. Die Ursache dessen wurde in Kapitel 2.3.1 ausführlich beschrieben und wird als NTK-Charakteristik bezeichnet. Auf Basis der RCM-Experimente können nun unter verschiedenen Druck- und Temperaturbedingungen die kraftstoffspezifischen Zündverzugszeiten bestimmt und visualisiert werden. Diese Daten bilden im weiteren Verlauf die Grundlage eventueller Optimierungsmaßnahmen der Kraftstoffkennzahlen CPI, DOZ und HSPI.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

3.2 Modifizierter direkteinspritzender CFR-Prüfmotor

Grundlage einer möglichen industriellen Akzeptanz neuer Kraftstoffkennzahlen stellt die weiterführende Verwendung des genormten und weltweit in Verwendung befindlichen CFR-Prüfmotors dar. Bereits in [1], [6] wurde unter anderem auf die Notwendigkeit der Modifikation des ROZ- bzw. MOZ-Prüfverfahrens zur Abbildung eines modernen Brennverfahrens eingegangen. Grundvoraussetzung jeglicher Änderung des Aggregates war die Möglichkeit mit vertretbarem Aufwand zwischen den Betriebsbedingungen der genormten Verfahren laut [97], [98], [99], [100] und neu entwickelter Methoden zu wechseln. Folgende Adaptionen wurden auf Basis dieser Vorgaben durchgeführt:

- Direkteinspritzender Injektor mit 60 bar Systemdruck unter Beibehaltung der Möglichkeit des Vergaserbetriebes
- Modernes Zündsystem (Zündspule)
- Glühstift inklusive Temperaturüberwachung mittels in der Glühstiftspitze integriertem Thermoelement. Einbauposition anstelle des genormten Pick-Up Sensors zur Klopfstärkendetektion.
- Hochdruckindiziermesstechnik zur Klopfbewertung des zu prüfenden Kraftstoffes.

Abbildung 3-2 zeigt anhand einer Schnittdarstellung des CFR-Zylinderkopfes die wesentlichen Modifikationen (rot hervorgehoben).

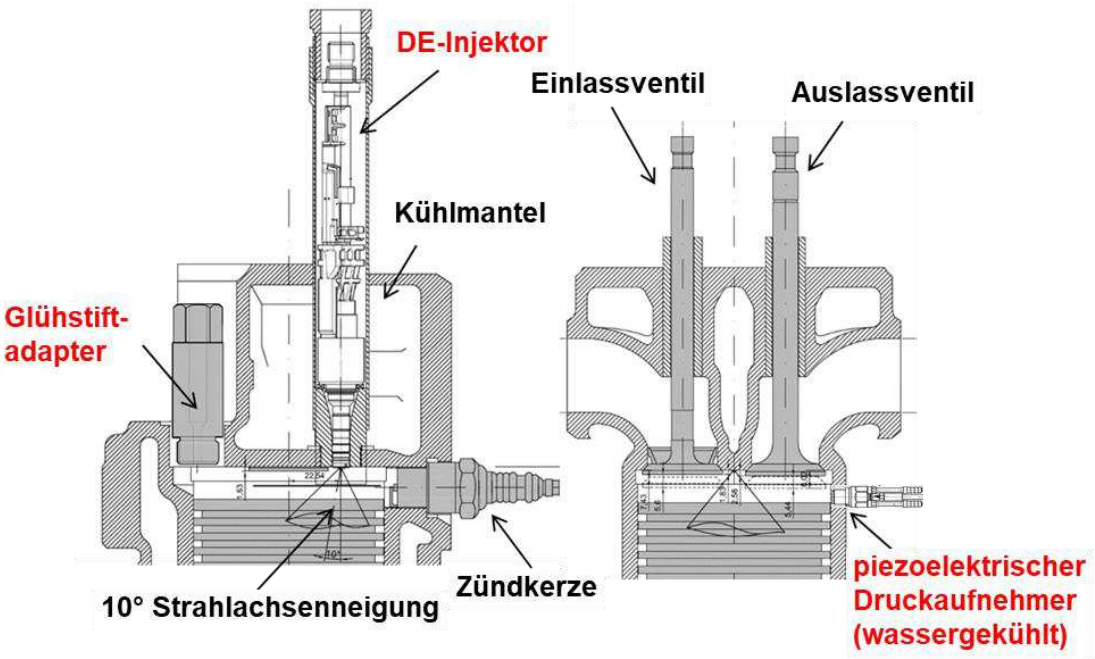


Abbildung 3-2: Schnittdarstellung des nach [1], [6] modifizierten CFR-Prüfmotors. DE-Injektor sowie piezoelektrischer Druckaufnehmer machen Bohrungen im Zylinderkopf notwendig. Der Glühstiftadapter wird anstelle des Pick-Up Sensors verschraubt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Auf Basis des modifizierten Aggregates wurden die folgenden drei Kennzahlen in [1], [6] entwickelt.

3.2.1 Compression Pre-Ignition Kennzahl (CPI)

Die CPI dient der Charakterisierung des kraftstoffspezifischen Vorentflammungsverhaltens infolge einer kritischen Gasphase im Brennraum. Das Messverfahren beruht auf dem variablen Verdichtungsverhältnis des DE-CFR-Prüfmotors unter konstanter Verbrennungsschwerpunktlage (MFB50%). Als Bewertungskriterium der Vorentflammungsneigung wird jenes Verdichtungsverhältnis herangezogen, welches erste Vorentflammungsphänomene des Kraftstoffes bewirkt. In Abbildung 3-3 ist schematisch der Ablauf einer CPI-Messung dargestellt.

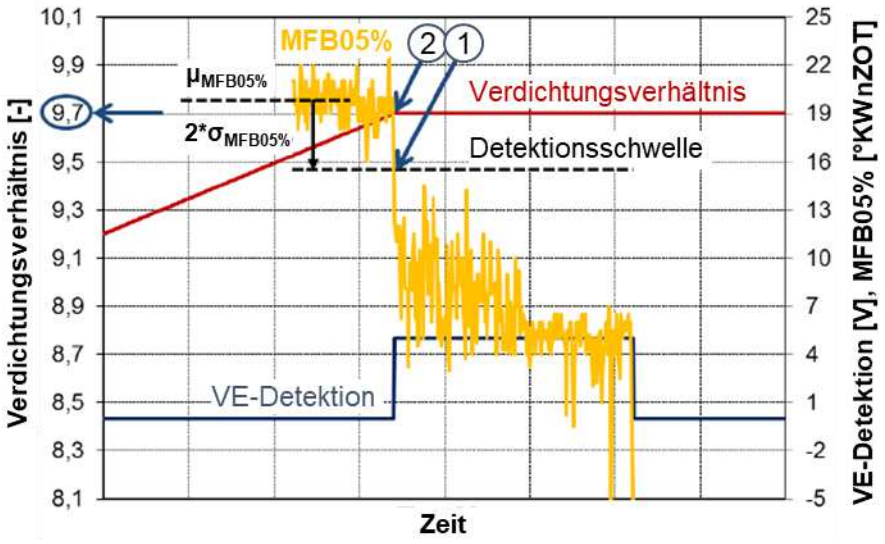


Abbildung 3-3: Schematischer Ablauf einer CPI-Messung [1] (geänderte Darstellung).

Die CPI-Methodik beruht auf einer sukzessiven Erhöhung (schematisch linear dargestellt) des geometrischen Verdichtungsverhältnisses des Motors (rote Linie), welche zu zunehmend kritischeren Bedingungen im Brennraum führt. Jede Verdichtungsstufe wird 5 Sekunden konstant gehalten bevor die Verdichtung um weitere 5 DCR (Digital Counter Reading) angehoben wird. Das DCR entspricht der am CFR-Motor einstellbaren Verdichtung und wird gemäß [95] nach Gleichung 3-1 in ein geometrisches Verdichtungsverhältnis ε umgerechnet.

$$\varepsilon = \frac{6345}{1850\text{-}DCR} + 1$$ **Gleichung 3-1**

ε…geometrisches Verdichtungsverhältnis
DCR…Digital Counter Reading

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Da der Motor über eine Hochdruckindizierung verfügt kann online der Brennbeginn (MFB05%, gelbe Linie) der einzelnen Zyklen beobachtet werden. Unterschreitet der MFB05% infolge der kritischen thermodynamischen Bedingungen eine definierte Detektionsschwelle wird dies als Vorentflammung identifiziert (Pfeil 1). Das zu diesem Zeitpunkt vorherrschende Verdichtungsverhältnis dient der Berechnung der kraftstoffspezifischen CPI. Als Detektionsschwelle wird der mittlere Brennbeginn ($\mu_{MFB05\%}$) jener Zyklen konstanter Verdichtung abzüglich der zweifachen Standardabweichung ($\sigma_{MFB05\%}$) herangezogen.

Gleichung 3-2 gibt die CPI-Berechnungsmethodik wieder. Die Variable ε beschreibt in dieser Gleichung das kritische Verdichtungsverhältnis, welches zur Vorentflammung von Isooktan bzw. der untersuchten Probe führt.

$$CPI = CPI_{Isooktan} + (\varepsilon_{Probe} - \varepsilon_{Isooktan}) * 20 \qquad \textbf{Gleichung 3-2}$$

$$CPI_{Isooktan} = 100$$

Um den Einfluss unterschiedlicher Umgebungsbedingungen (Lufttemperatur, Luftdruck, Feuchtigkeit etc.) auszuschließen, wird zu Messbeginn das kritische Kompressionsverhältnis eines Referenzkraftstoffes ermittelt und eine CPI von 100 zugewiesen. Als Referenzkraftstoff wurde nach [1], [6] Isooktan gewählt, da aufgrund der Definition als PRF von einer ausreichenden Verfügbarkeit ausgegangen werden kann.

Die Betriebsrandbedingungen des Prüfverfahrens sind in Tabelle 4 auf Seite 51 dargestellt. Da dieses Verfahren in [1], [6] zur Bewertung hochalkoholhaltiger Kraftstoffe entwickelt wurde, war eine signifikant hohe Ansauglufttemperatur von 200 °C gewählt worden, um ebenfalls reines Ethanol zur Selbstzündung zu bringen. Ob diese hohe Temperatur für Kraftstoffe geringeren Alkoholgehaltes zielführend ist, wird in Kapitel 6.1.1 analysiert.

3.2.2 Hot Spot Pre-Ignition Kennzahl (HSPI)

Das HSPI-Verfahren wurde zur Charakterisierung der kraftstoffspezifischen Selbstzündungsneigung an heißen Oberflächen (Glühzündung) unter motorischem Betrieb entwickelt. Die Methodik basiert auf einem aufheizbaren Glühstift mit in dessen Spitze integriertem Thermoelement. Im Gegensatz zur CPI ist das Verdichtungsverhältnis als konstant definiert. Abbildung 3-4 zeigt exemplarisch den Ablauf einer HSPI-Messung.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

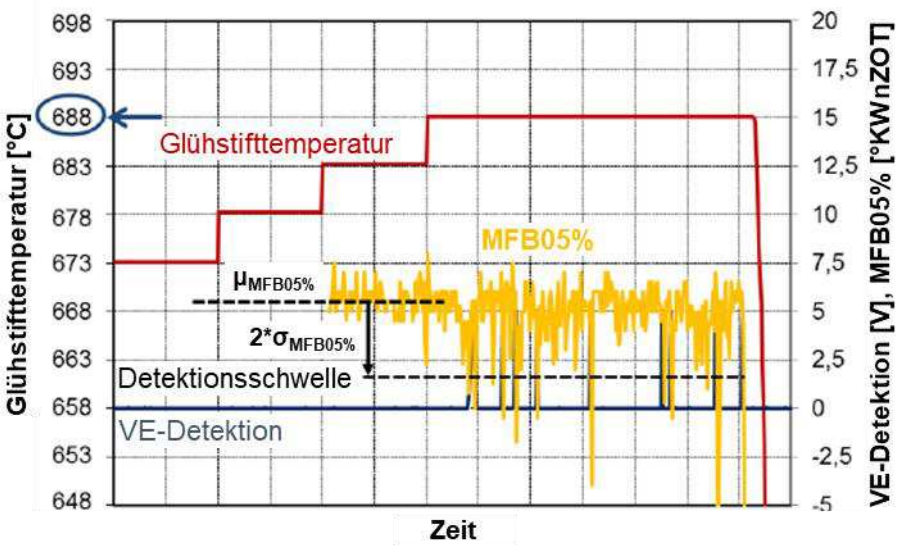


Abbildung 3-4: Schematischer Ablauf einer HSPI-Messung [1] (geänderte Darstellung).

Im Verlauf der Messung wird der Glühstift in 5 °C-Schritten stufenweise aufgeheizt (rote Linie) bis dessen Hot Spot zu einem kritischen Selbstzündungszustand des Luft-Kraftstoff-Gemisches führt. Die Identifikation einer Glühzündung erfolgt wie zuvor anhand einer auf den Brennbeginn basierenden Detektionsschwelle. Analog der CPI-Messung wird die Glühzündungs-Detektionsschwelle per Mittelwert ($\mu_{MFB05\%}$) und Standardabweichung ($\sigma_{MFB05\%}$) des Brennbeginns ermittelt.

Zur Berechnung der HSPI nach Gleichung 3-3 wird jene Glühstifttemperatur herangezogen, welche zur 1. Unterschreitung der Detektionsschwelle führt. Auch in diesem Fall bildet Isooktan den Referenzkraftstoff mit einer HSPI von 100. Der Parameter GST beschreibt die kritische Glühstifttemperatur bei welcher die Referenz Isooktan bzw. die zu messende Probe selbstzündet.

$$HSPI = HSPI_{Isooktan} + \frac{GST_{Probe} - GST_{Isooktan}}{2} \qquad \textbf{Gleichung 3-3}$$

$$HSPI_{Isooktan} = 100$$

Tabelle 4 auf Seite 51 gibt die Betriebsrandbedingungen des Verfahrens wieder.

3.2.3 Direkteinspritzende Oktanzahl (DOZ)

Während die kraftstoffspezifische Selbstzündungscharakterisierung vor regulärer Zündeinleitung das Ziel der CPI bzw. der HSPI ist, wurde die DOZ zur Bewertung des konventionellen Klopfverhaltens der Kraftstoffe entwickelt. Im Fokus der DOZ-

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Entwicklung in [1], [6] standen gleich der CPI und HSPI, hochalkoholhaltige Kraftstoffe. Wie bereits in Kapitel 2.4 erläutert, weicht das Klopfverhalten der Kraftstoffe in modernen direkteinspritzenden Ottomotoren deutlich von jenem laut ROZ bzw. MOZ zu erwartendem ab. Mitverantwortlich für die teils signifikante Abweichung ist die hohe Verdampfungsenthalpie der Kraftstoffe, welche durch den Vergaserbetrieb nicht hinreichend genau für moderne DE-Motoren abgebildet wird. Dies gab in [1], [6] Anlass eine neue Klopfkennzahl unter direkteinspritzenden CFR-Betrieb zu entwickeln.

Das Verfahren der DOZ basiert ähnlich der CPI, auf dem variablen Verdichtungsverhältnis des CFR-Motors. In diesem Fall wird der zu prüfende Kraftstoff jedoch nicht zur Vorentflammung gebracht sondern analog der MOZ-Methodik eine definierte Klopfintensität eingestellt. Die Zielintensität leitet sich über die Klopfhäufigkeitsverteilung (Klopfhistogramm) einer Referenzmessung mit Isooktan ab. Die Klopfhäufigkeitsverteilung und somit die Klopfintensität wird abweichend zur ROZ bzw. MOZ über moderne Indiziermesstechnik online ausgewertet. Der Zündzeitpunkt wird ident der MOZ-Methodik in Abhängigkeit des vorliegenden Verdichtungsverhältnisses gewählt. Anhand Abbildung 3-5 lässt sich die DOZ-Methodik am Beispiel eines E40-Kraftstoffes nachvollziehen.

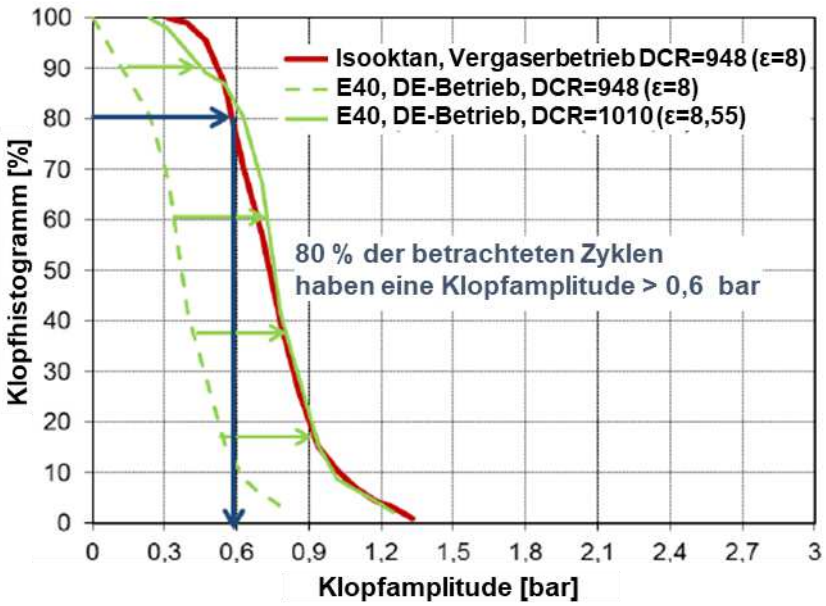


Abbildung 3-5: Beispiel einer DOZ-Messung mit E40-Kraftstoff [1] (geänderte Darstellung)

Zunächst wird die Referenzlinie mittels Isooktan im Vergaserbetrieb des CFR-Motors erzeugt (rote Linie). Hierzu wird das Verdichtungsverhältnis auf eine DCR von 948

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

eingestellt (ε = 8) und die sich ergebende Klopfhäufigkeitsverteilung aufgezeichnet. In diesem Beispiel ist anhand der Referenzlinie abzulesen, dass 80 % der Zyklen eine Klopfamplitude > 0,6 bar haben. Im weiteren Verlauf wird die zu prüfende Probe (E40) verwendet und das CFR-Aggregat auf DE-Betrieb umgestellt. Bei gleichem Verdichtungsverhältnis (ε = 8) ergibt sich durch die hohe Klopffestigkeit von E40 ein deutlich unkritischeres Klopfniveau (grün gestrichelte Linie). Im Folgenden wird das geometrische Verdichtungsverhältnis soweit angehoben bis die Histogrammkurve von E40 (grüne Linie) deckungsgleich mit jener von Isooktan ist (rote Linie). Das sich dabei ergebende Verdichtungsverhältnis bzw. DCR ist Basis der anschließenden DOZ-Berechnung. Diese geschieht über ein Polynom 5. Grades nach Gleichung 3 in [1], welches aus der MOZ-Tabelle [98] resultiert.

Abschließend gibt Tabelle 4 einen Überblick der Betriebsrandbedingungen der eben diskutierten Kraftstoffkennzahlen sowie der genormten Verfahren ROZ und MOZ.

Tabelle 4: CFR-Betriebsbedingungen relevanter Kraftstoffkennzahlen [1], [6], [97], [98], [99], [100]. VG…Vergaser; DE…Direkteinspritzung; var….variabel.

Betriebsbedingung	Einheit	ROZ	MOZ	DOZ	CPI	HSPI
Gemischbildung	[-]	VG	VG	DE	DE	DE
Drehzahl	[U/min]	600	900	900	900	900
Zündzeitpunkt ZZP	[°KWvZOT]	13	f(ε)	f(ε)	f(MFB50%)	f(MFB50%)
Umsatzschwerpunkt MFB50%	[°KWnZOT]	f(ZZP)	f(ZZP)	f(ZZP)	35	25
Ansauglufttemp.	[°C]	52	38	149	200	149
Gemischtemperatur	[°C]	-	149	-	-	-
Luft-Kraftstoff-verhältnis λ	[-]	var.	var.	1,00	1,00	1,00
Einspritzende	[°KWvZOT]	-	-	203	203	203
Kraftstoffraildruck	[bar]	-	-	60	60	60
Verdichtung ε	[-]	var.	var.	var.	var.	7

Im Unterschied zu [1], [6] wurde in der vorliegenden Arbeit bei der HSPI-Methodik das Verdichtungsverhältnis von 8 auf 7 reduziert. Der Grund ist, dass einzelne Kraftstoffe bei einem Kompressionsverhältnis von 8 und einer Ansauglufttemperatur von 149 °C bereits Verbrennungsanomalien zeigten.

Bezüglich der CPI, HSPI und DOZ ist grundsätzlich zu beachten, dass diese in [1], [6] auf Basis hochalkoholischer Kraftstoffe (bis zu 100 % Alkohol) entwickelt wurden und in dieser Arbeit deren Anwendbarkeit auf reale Mischkraftstoffe übertragen werden soll.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek WIEN Your knowledge hub

3.3 Moderner Einzylinder-Forschungsmotor

Wie bereits einleitend in Kapitel 3 erwähnt, wurde das dieser Arbeit zugrundeliegende FVV-Forschungsvorhaben unter anderem in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University durchgeführt. Da deren Ergebnisse ebenfalls für die vorliegende Dissertation von Relevanz sind, wird nachfolgend deren Versuchsträger und Prüfmethoden kurz beschrieben.

Die Validierung der HSPI bzw. die fundamentale Analyse der oberflächeninduzierten Selbstzündung (Glühzündung) wurde an einem Einzylinder-Forschungsmotor vorgenommen. Da sich die vorliegende Arbeit vordergründig mit der Entwicklung und Validierung neuer Kraftstoffkennzahlen befasst, wird betreffend die fundamentale Betrachtung der Glühzündung sowie die detaillierte Beschreibung des Versuchsträgers und der Prüfmethoden auf Kapitel 5.3 bzw. Kapitel 6.2 in [7] verwiesen. Abseits der Glühzündung wurde der Versuchsträger ebenfalls dazu genutzt, die Vorentflammung infolge einer kritischen Gasphase detailliert zu untersuchen sowie ein weiteres Aggregat zu Validierung der CPI zu Verfügung zu haben.

Tabelle 5 gibt einen Überblick der wesentlichen Spezifikationen des Einzylinder-Forschungsmotors.

Tabelle 5: Technische Daten des Einzylinder-Forschungsmotors am Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University.

Parameter	Einheit	Wert
Gemischbildung	[-]	DE
Bohrung	[mm]	75
Hub	[mm]	90,5
Zylinderzahl	[-]	1
Hub/Bohrungsverhältnis	[-]	1,2
Hubvolumen	[cm^3]	400
Ventile pro Zylinder	[-]	4
Verdichtungsverhältnis	[-]	10,9

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Glühzündungsuntersuchung

Zur experimentellen Untersuchung der oberflächeninduzierten Vorentflammung wurde der Brennraum des Einzylinder-Forschungsmotors mit einem temperaturüberwachten Glühstift ausgestattet. Dabei handelte es sich um den baugleichen Glühstift wie er bereits am modifizierten DE-CFR-Motor bei der HSPI zum Einsatz kam. Analog der CFR-Methodik wurde die Glühstifttemperatur stufenweise erhöht. Jede Temperaturstufe umfasste 2000 Arbeitsspiele wobei die Detektion der Vorentflammung über eine Zylinderdruckindizierung vorgenommen wurde.

Als kraftstoffspezifischer Glühzündungsparameter wurde jene kritische Glühstifttemperatur herangezogen, welche eine Glühzündungshäufigkeit von 2 % der Zyklen hervorrief. Tabelle 6 zeigt die Betriebsbedingung der Glühzündungsuntersuchung am Einzylinder-Forschungsmotor.

Tabelle 6: Betriebsbedingungen der Glühzündungsexperimente am Einzylinder-Forschungsmotor.

Paramter	Einheit	Wert
Drehzahl	[U/min]	1500
Ladedruck (absolut)	[mbar]	1500
Abgasverbrennungsluftverhältnis λ	[-]	1,00
Einlasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWnLWOT]	10
Auslasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWvLWOT]	10
Kraftstoffdruck	[bar]	200
Einspritzbeginn	[°KWvZOT]	300
Einlasskanaltemperatur	[°C]	30
Umsatzschwerpunkt	[°KWnZOT]	45

Gasphasenvorentflammungsuntersuchung

Auf Basis derselben statistischen Auswertemethodik der Glühzündungsexperimente wurden die Vorentflammungsanalysen am Einzylinder-Forschungsmotor durchgeführt. Anstelle der variablen Glühstifttemperatur wurde hierbei jedoch das Ladedruckniveau schrittweise angehoben. Der Glühstift war bei diesem Versuch deaktiviert. Als kraftstoffcharakterisierender Parameter diente jenes kritische Ladedruckniveau, welches zu einer Vorentflammungshäufigkeit von 2% der Zyklen führte. Je Druckstufe war auch bei dieser Analyse ein Zeitintervall von 2000 Arbeitsspielen definiert worden. In Tabelle 7 ist der Betriebspunkt des Experimentes dargestellt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Tabelle 7: Betriebsbedingungen der Gasphasenzündungsexperimente am Einzylinder-Forschungsmotor.

Paramter	Einheit	Wert
Drehzahl	[U/min]	1500
Ladedruck (absolut)	[mbar]	variabel
Abgasverbrennungsluftverhältnis λ	[-]	1,00
Einlasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWnLWOT]	10
Auslasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWvLWOT]	10
Kraftstoffdruck	[bar]	200
Einspritzbeginn	[°KWvZOT]	300
Einlasskanaltemperatur	[°C]	100
Umsatzschwerpunkt	[°KWnZOT]	45

Wie bereits zu Beginn des Kapitels erwähnt sind Details zu den experimentellen und numerischen Untersuchungen der RWTH Aachen University in Kapitel 5 von [7] zu entnehmen.

3.4 Modernes Dreizylinder-Serienaggregat

Mit dem Ziel der Entwicklung geeigneter Kraftstoffkennzahlen zur Beschreibung von Verbrennungsanomalien im realen Motorbetrieb ist es unumgänglich ein aktuelles Serienaggregat als Versuchsträger bereitzustellen. Um dieser Vorgabe zu entsprechen und eine Validierung durchführen zu können, wurde ein moderner aufgeladener Dreizylinder-Ottomotor zur Verfügung gestellt. Die wesentlichen Spezifikationen des Versuchsträgers sind in nachstehender Tabelle 8 aufgelistet.

Tabelle 8: Technische Spezifikationen des Dreizylinder-Vollmotors.

Parameter	Einheit	Wert
Gemischbildung	[-]	DE
Bohrung	[mm]	74
Hub	[mm]	77,4
Zylinderzahl	[-]	3
Hub/Bohrungsverhältnis	[-]	1,05
Hubvolumen	[cm^3]	999
Ventile pro Zylinder	[-]	4
Verdichtungsverhältnis	[-]	10,5

Auf Basis des obigen Versuchsträgers wurden unter statistisch reproduzierbaren Betriebsbedingungen die Untersuchungen der klopfende Verbrennung sowie der

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Vorentflammung infolge einer kritischen Gasphase vorgenommen. Die experimentellen Analysen der Glühzündung konnten auf dem Serienmotor nicht durchgeführt werden, da aufgrund der Komplexität von einer Adaption des Glühstiftes im Vollmotor abgesehen wurde. Die Validierung der HSPI fand ausschließlich am Einzylinder-Forschungsmotor des VKA der RWTH Aachen University statt [7].

3.4.1 Aufbau und Messtechnik

Zur Messung der relevanten thermodynamischen Zustandsgrößen wurden Luft- sowie Abgaspfad des Motors mit einer Vielzahl an Druck- und Temperaturmessstellen ausgestattet. Zusätzliche Messeinrichtungen zur Bestimmung der Luftmasse und des Kraftstoffverbrauches sind ebenfalls vorgesehen worden. Ein Abgasmessschrank ermittelt die Abgasemissionen CO, CO_2, O_2, HC und NO_X während des Experimentes. Zur zylinderselektiven Verbrennungsanalyse und thermodynamischen Bewertung wurde eine Hoch- sowie Niederdruckindizierung am Versuchsträger eingebunden.

Abbildung 3-6 zeigt eine schematische Darstellung des Prüfstandsaufbaues.

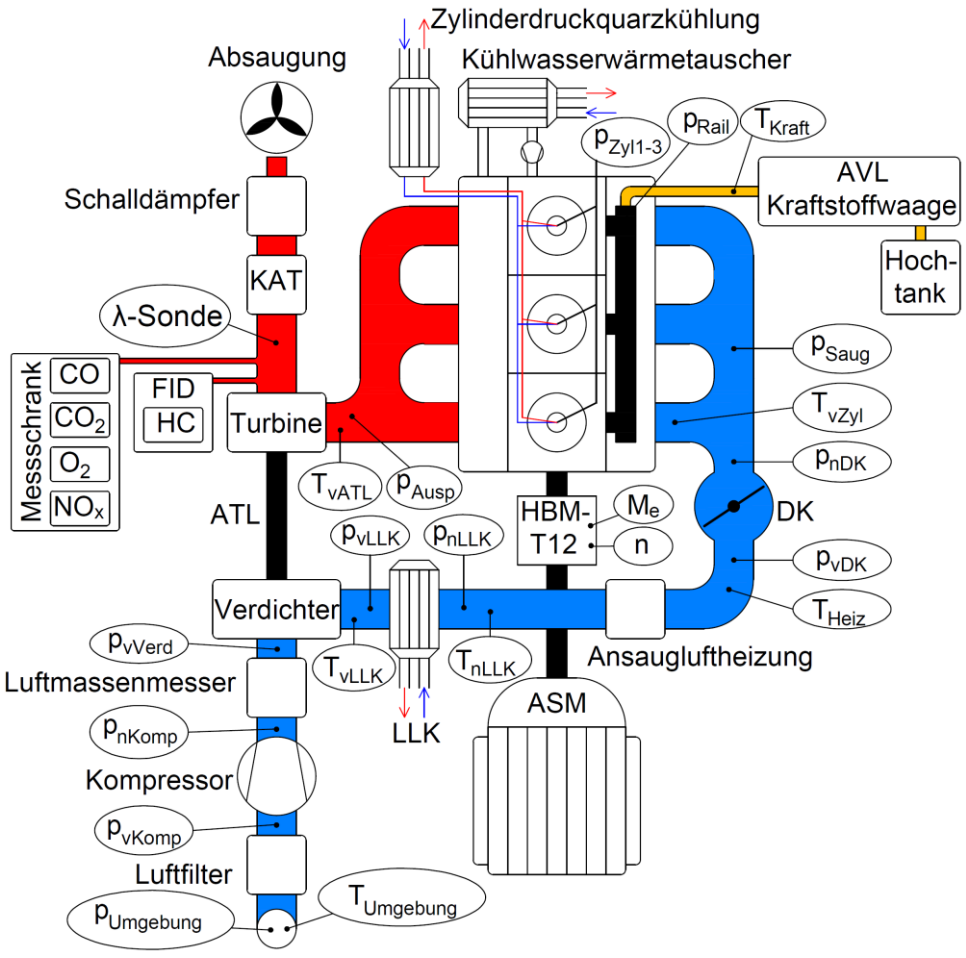


Abbildung 3-6: Schematische dargestellter Prüfstandsaufbau des abgasturboaufgeladenen Dreizylinder-Serienmotors.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Tabelle 9 und Tabelle 10 geben anschließend einen Überblick der verwendeten Messtechnik.

Tabelle 9: Standardmesstechnik am untersuchten Vollmotor.

Messgerät	**Messgröße**
Thermoelement Typ K	Temperatur
Keller PAA-21S	Druck
ABB Sensflow P	Luftmasse
NGK Breitbandlambdasonde	Luftzahl
AVL Fuel Mass Flow Meter and Fuel Temperature Control 735S/753C	Kraftstoffverbrauch
Siemens Ultramat 6	CO
Siemens Ultramat 6	CO2
Siemens Oxymat 6	O2
Eco Physics CLD 700	NOX
Testa FID 1230 Modul	HC

Tabelle 10: Indiziermesstechnik am untersuchten Vollmotor.

Indiziermesstechnik	
Indiziersystem	AVL IndiModul 622 GigaBit
piezoelektrischer Druckaufnehmer (Brennraum)	Kistler 6061B
piezoresistiver Druckaufnehmer (Einlass)	Kistler 4049B
piezoresistiver Druckaufnehmer (Auslass)	Kistler 4007C
Ladungsverstärker für piezoelektrische Druckaufnehmer	Kistler 5011
Ladungsverstärker für piezoresistive Druckaufnehmer	Kistler 4624AK

3.4.2 Analysemethodik der Klopf- und Vorentflammungsuntersuchung

Zur Validierung der Kraftstoffkennzahlen DOZ und CPI wurden umfassende Experimente am Vollmotor durchgeführt. Folgend werden detailliert die Messmethoden sowie die Betriebsbedingungen vorgestellt. Es sei angemerkt, dass jedem untersuchten Kraftstoff ein Ölwechsel inklusive Ölfilterwechsel vorausging, um in Bezug auf eine eventuelle Ölverdünnung vergleichbare Ausgangsbedingungen für die Analysen zu schaffen. Bei dem verwendeten Motoröl handelt es sich um ein Öl der Viskositätsklasse 5W30. Dieses wurde zu Projektbeginn in ausreichender Menge zur Verfügung gestellt um sicherzustellen, dass es sich um Motoröl der gleichen Charge handelt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Klopfuntersuchungen

Abseits der detaillierten Analyse des kraftstoffspezifischen Klopfverhaltens in einem modernen DE-Motor war Schwerpunkt dieser Untersuchungen die Validierung der relevanten Klopfkennzahlen ROZ, MOZ und DOZ. Ausgehend von den aus dieser Analyse gewonnen Erkenntnissen soll eine, falls notwendig, gezielte Adaption des DOZ-Verfahrens vorgenommen werden.

Bei den für die Untersuchung gewählten Lastpunkten handelt es sich um klopfbegrenzte Betriebspunkte. Grundsätzlich ist es das Ziel eine wirkungsgradoptimale Verbrennungslage (Umsatzschwerpunkt MBF50% = 8°KWnZOT [23]) zu gewährleisten. In einem klopfbegrenzten Betriebspunkt ist dies jedoch aufgrund eines thermodynamisch kritischen Endgaszustandes und den daraus hervorgehenden Selbstzündungen (Klopfen) nicht möglich. Zur Reduktion der Klopfintensität wird bei vorhandener Klopfregelung der Zündzeitpunkt automatisch in Richtung „Spät“ verschoben. Diese Maßnahme hat zur Folge, dass die Endgastemperatur aufgrund des reduzierten Druckniveaus zu Verbrennungsbeginn fällt.

In Abbildung 3-7 wird der Betrieb an der Klopfgrenze anhand eines Beispiels erläutert.

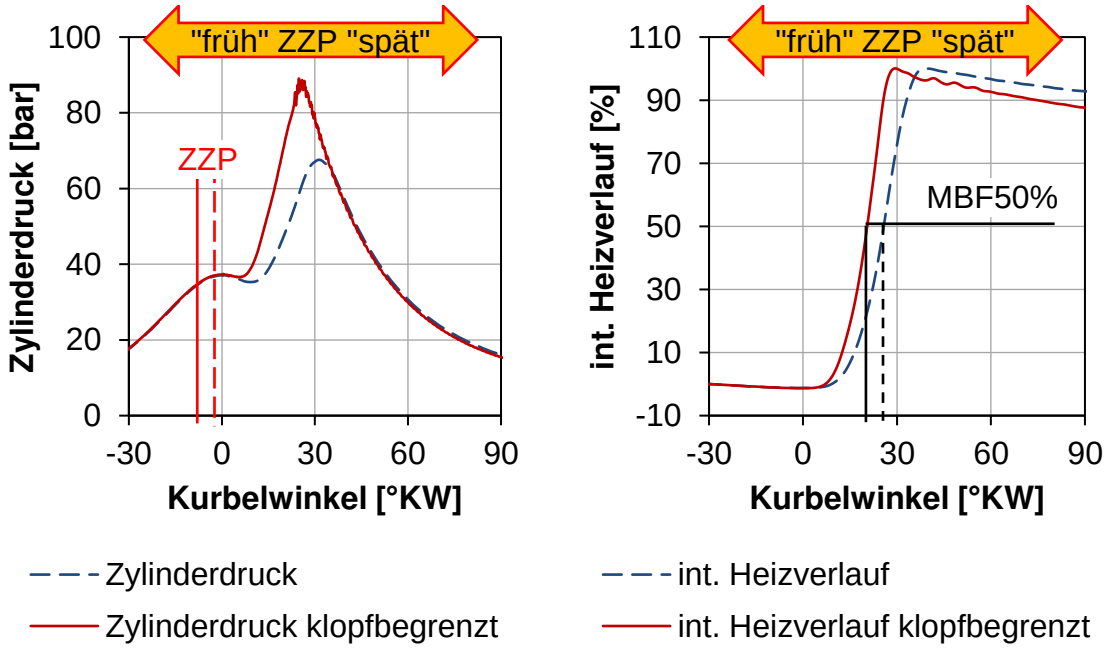


Abbildung 3-7: Methodik des Betriebes an der motorischen Klopfgrenze. Vergleich einer klopfbegrenzten Verbrennung (rot, durchgezogene Linie) mit einer regulären, nicht klopfenden Verbrennung (blau).

Es ist ein deutlich reduzierter Spitzendruck der Verbrennung aufgrund der späteren Zündung zu erkennen (blau).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Tabelle 11 gibt eine Übersicht der betrachteten Betriebspunkte. Um einen konstanten Betriebspunkt an der Klopfgrenze einzustellen, wurde die Klopfregelung des Motorsteuergerätes deaktiviert.

Tabelle 11: Betriebspunkte (BP) der Klopfanalyse am Dreizylinder-Serienaggregat. KG…Klopfgrenze

Betriebspunkt	Drehzahl	Drossel-klappe	Ladedruck	Ladeluft-temperatur	Lambda	Zünd-zeitpunkt
[-]	[U/min]	[%]	[bar abs.]	[°C]	[-]	[°KWvZOT]
BP1	1500	100	1,50	35	1,00	KG
BP2	1500	100	1,80	35	1,00	KG
BP3	2000	100	1,80	35	1,00	KG
BP4	2500	100	1,80	35	1,00	KG
BP5	1500	100	1,50	35	0,95	KG
BP6	1500	100	1,50	50	0,95	KG
BP7	1500	100	1,50	120	0,95	KG

Anhand Tabelle 11 ist abzuleiten, dass neben dem Drehzahleinfluss die Auswirkungen einer Kraftstoffanreicherung sowie der Einfluss eines Ladelufttemperaturanstieges auf die Klopfcharakteristik bewertet wurden.

Als Klopfgrenze (KG) wurde in dieser Arbeit jener frühestmögliche Zündzeitpunkt bezeichnet bei welchem eine über 200 Arbeitszyklen gemittelte Klopfamplitude (KA) von 1 bar erzielt wurde. Die Detektion der Klopfamplitude basiert auf dem hochpassgefilterten Zylinderdrucksignal und ist in Abbildung 3-8 exemplarisch dargestellt.

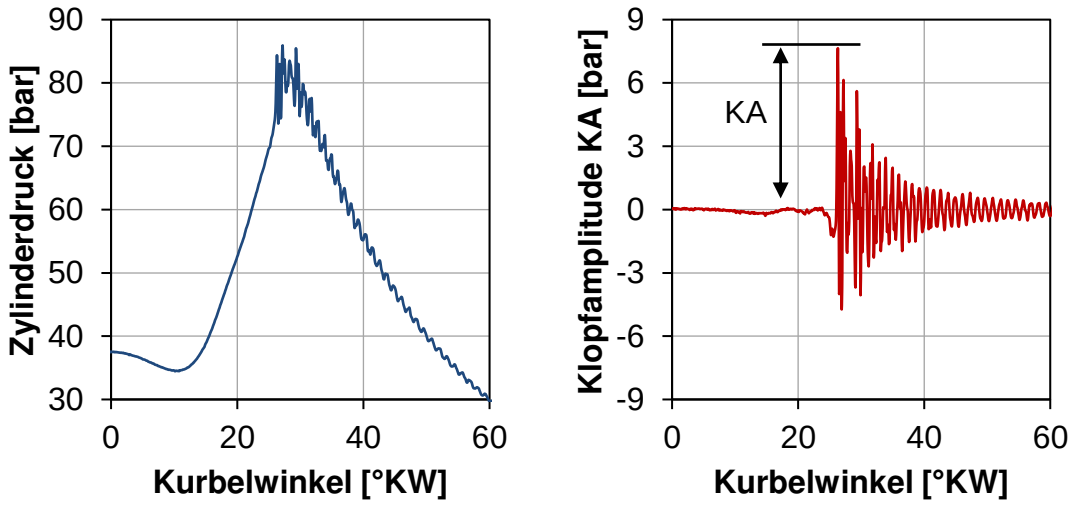


Abbildung 3-8: Definition der Klopfamplitude (KA) über das hochpassgefilterte Zylinderdrucksignal (exemplarisch für diesen Zyklus etwa 7 bar).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Als Bewertungskriterium der Kraftstoffe wird der frühestmögliche Umsatzschwerpunkt (MBF50%) herangezogen, da dieser für die thermodynamische Bewertung der Verbrennung von Relevanz ist. Eine Betrachtung des Zündzeitpunktes ist aufgrund der analysierten Kraftstoffmatrix weniger zielführend, da die kraftstoffspezifischen Verbrennungsgeschwindigkeiten (z.B. Alkohol) bei gleichem Zündzeitpunkt zu unterschiedlichen Schwerpunktlagen führen.

Vorentflammungsuntersuchungen (VE-Untersuchungen)

Abseits der Klopfuntersuchungen wurden am Dreizylinder-Serienaggregat umfassende Vorentflammungsanalysen durchgeführt. Basis der VE-Untersuchung am Dreizylinder-Serienaggregat bildete eine variable Ladelufttemperatur unter konstantem Ladedruck. Als Beurteilungskriterium der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes wurde jene Ladelufttemperatur herangezogen, welche zu ersten Verbrennungsanomalien führte. Um das notwendige Ladedruckniveau auch bei hohen Saugrohrtemperaturen darstellen zu können, wurde die Abgasturboaufladung des Versuchsträgers für die Vorentflammungsexperimente um eine externe mechanische Aufladung erweitert. Tabelle 12 beschreibt die Betriebsparameter dieser Untersuchung.

Tabelle 12: Betriebsbedingungen der Vorentflammungsuntersuchung am Dreizylinder-Serienmotor. Zur Sicherstellung des Ladedruckniveaus unter hohen Ladelufttemperaturen wurde das Aggregat um einen externen Kompressor erweitert.

Paramter	Einheit	Wert
Drehzahl	[U/min]	1500
Ladedruck (absolut)	[mbar]	2000
Abgasverbrennungsluftverhältnis λ	[-]	1,00
Einlasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWnLWOT]	10
Auslasssteuerzeit (ab 1mm Hub)	[°KWvLWOT]	10
Kraftstoffdruck	[bar]	120
Einspritzbeginn	[°KWvZOT]	265
Einlasskanaltemperatur	[°C]	variabel
Umsatzschwerpunkt	[°KWnZOT]	45

Als Definitionskriterium einer Vorentflammung diente der Zeitpunkt 5 % umgesetzter Gemischmasse (MFB05%, Verbrennungsbeginn) und der maximale Zylinderdruck der Verbrennung. Analysen der Vorentflammungsexperimente haben gezeigt, dass infolge der späten Verbrennungslage die statistisch belastbare Zylinderdruckschwelle zur VE-

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Detektion bei 100 bar liegt (in Kombination mit einem deutlich früheren Brennbeginn). Die VE-Definition lässt sich gemäß Gleichung 3-4, Gleichung 3-5 und Gleichung 3-6 beschreiben.

$$MFB05\%_{VE} \leq ZZP \qquad \textbf{Gleichung 3-4}$$

oder

$$p_{max,\,VE} > 100\ bar \qquad \textbf{Gleichung 3-5}$$

und

$$MFB05\%_{VE} \leq \mu_{MFB05\%} - 3*\sigma_{MBF05\%} \qquad \textbf{Gleichung 3-6}$$

p_{max}……maximaler Zylinderdruck der Verbrennung

MFB05%...Brennbeginn (Zeitpunkt 5% umgesetzter Gemischmasse)

$\mu_{MFB05\%}$.....Mittelwert des MFB05% der regulären Arbeitsspiele zuvor

$\sigma_{MFB05\%}$.....Standardabweichung des MFB05% der regulären Arbeitsspiele zuvor

ZZP…….Zündzeitpunkt

Die Ursache, weshalb abseits der Druckschwelle zusätzlich der Verbrennungsbeginn (MFB05%) zur Detektion einer VE herangezogen wurde, wird in Abbildung 3-9 erläutert. Das Diagramm stellt unter gleichen konstanten Betriebsbedingungen (100 °C Ansauglufttemperatur) einen regulären Verbrennungszyklus einer Vorentflammung gegenüber.

Anhand der geschleppten Kompressionskurve ist zu erkennen, dass aufgrund der hohen Ansauglufttemperatur sowohl der Vorentflammungszyklus als auch das reguläre Arbeitsspiel einen Druckanstieg vor Einleitung der regulären Funkenzündung aufweisen. Im Unterschied zur Vorentflammung kommt es jedoch beim regulären Zyklus nicht zum Durchzünden des Luft-Kraftstoff-Gemisches. Die Annahme ist, dass durch die bereits ablaufende Expansion eine fortschreitende Selbstzündung unterbunden wird, da der thermodynamische Gemischzustand nicht ausreichend kritisch ist um den Oxidationsprozess aufrecht zu erhalten. Erst nach dem regulären Zündzeitpunkt wird das Gemisch vollständig umgesetzt. Würde an dieser Stelle ausschließlich die Druckgrenze von 100 bar herangezogen werden, wäre die dargestellte Vorentflammung nicht identifiziert worden. Eine reduzierte Druckschwelle zur VE-Detektion war ebenso nicht zielführend, da vermehrt Fehldetektionen auftraten, welche eine statistische Auswertung deutlich erschwerten.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

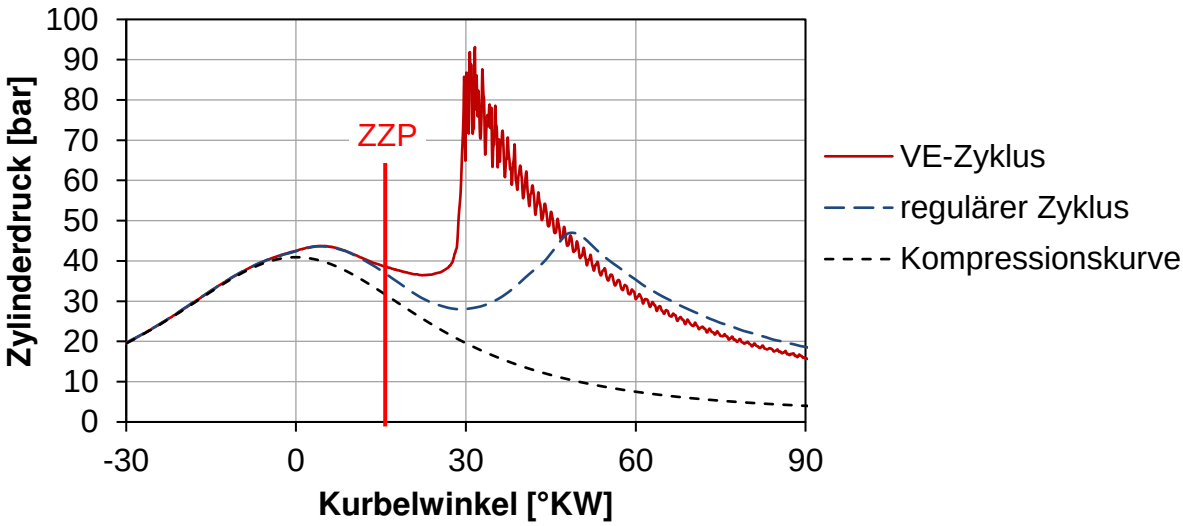


Abbildung 3-9: Vergleich einer regulären Verbrennung mit einer Vorentflammung bei 100 °C Ansauglufttemperatur und 2 bar abs. Ladedruck.

Mittels des integrierten Heizverlaufes in Abbildung 3-10 ist zunächst bei beiden Zyklen ein Anstieg der Umsatzrate vor Zündzeitpunkt ZZP zu verzeichnen. Die umgesetzte Gemischmasse der regulären Verbrennung ist jedoch zum ZZP unterhalb von 5%, welche als Detektionsschwelle definiert wurde, wogegen der Vorentflammungszyklus einen MFB05% vor ZZP zeigt.

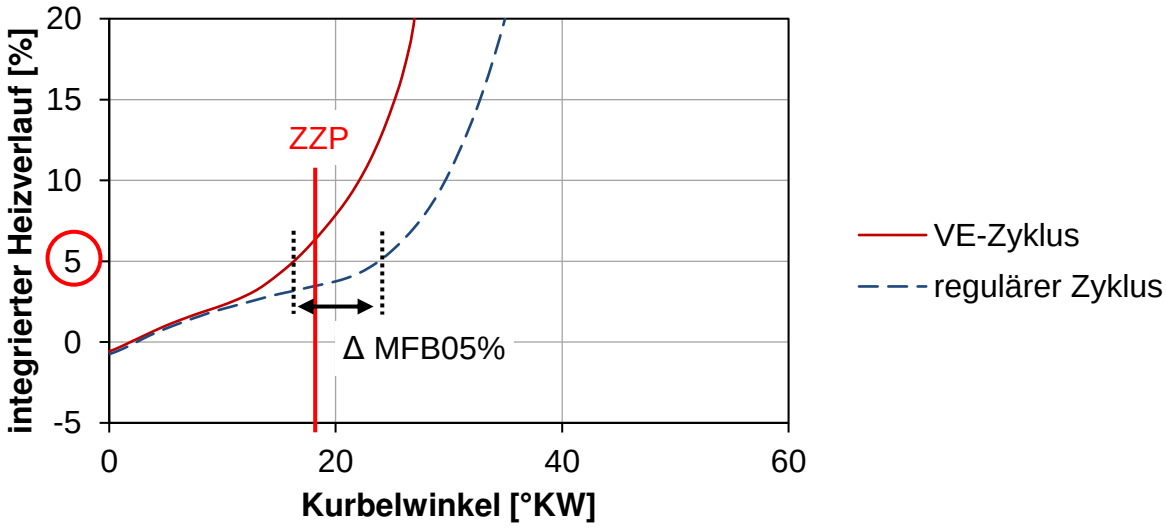


Abbildung 3-10: Vergleich des integrierten Heizverlaufes einer Vorentflammung und einer regulären Verbrennung bei 100 °C Ansauglufttemperatur. Datengrundlage bilden die Arbeitsspiele in Abbildung 3-9.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Die Kombination der beiden Verbrennungsparameter Zylinderdruck und MFB05% bietet die Möglichkeit einer deutlichen Abgrenzung der Vorentflammung zur regulären Verbrennung.

Der Versuchsablauf sah eine schrittweise Steigerung der Ansauglufttemperatur um 5 °C vor. Der Motor wurde bei jeder Temperaturstufe 3 Minuten (2250 Zyklen je Zylinder) unter konstanten Bedingungen betrieben. Das Experiment war abgeschlossen, sobald erste Vorentflammungen innerhalb des definierten Messfensters detektiert wurden. Einem jeden Versuch ging infolge des Ölwechsels eine 15-minütige Ölkonditionierung voraus und daran anschließend eine Systemkonditionierung für 10 Minuten. Nach erfolgter Konditionierung wurde der Betriebspunkt bei einer Drehzahl von 1500 U/min eingestellt und das eigentliche Vorentflammungsexperiment gestartet. Der Messzyklus ist in Abbildung 3-11 schematisch dargestellt.

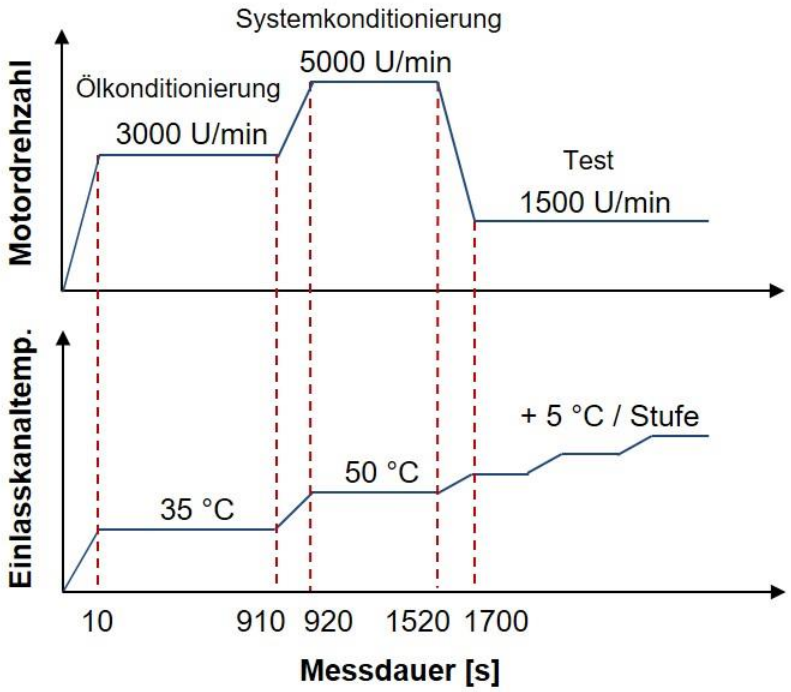


Abbildung 3-11: Ablauf des Vorentflammungsexperiments.

Aufgrund der äußerst limitierten Kraftstoffmenge hat man sich für die Messmethodik der Vorentflammungstriggerung mittels variabler Ansauglufttemperatur entschieden. Diese Methodik ermöglichte wiederholbare Messungen mit hoher Reproduzierbarkeit bei gleichzeitig minimalem Kraftstoffverbrauch. Eine statistische Bewertung stochastischer Vorentflammungen mittels eines mehrstündigen Dauerlaufes konnte nicht durchgeführt werden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

4 Auswahl der zu untersuchenden Kraftstoffe

Es wurde eine komplexe Kraftstoffmatrix von mehr als 30 Kraftstoffen zur Entwicklung und Validierung der potenziellen Prüfmethoden herangezogen. Die in Tabelle 13 dargestellte Kraftstoffmatrix umfasst sowohl Kraftstoffe bestehend aus einer Vielzahl unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe, folgend Realgemische genannt, als auch 3- bzw. 4-Komponenten-Kraftstoffe, sogenannte CFD Surrogate. Letztgenannte dienten der reaktionskinetischen Simulationen, welche projektbegleitend am PCFC bzw. am VKA der RWTH Aachen University [7] durchgeführt wurden.

Zur Analyse des komponentenspezifischen Selbstzündungseinflusses wurden folgende Kraftstoffkomponenten zu 20 % mol. bzw. die Alkohole zu 20% und 40 % mol. einem Basiskraftstoff beigemengt:

- iso-Paraffine: Isohexan, Isooktan
- Olefine: n-Hexen
- Cycloalkane: Cyclohexan
- Aromate: Toluol
- Alkohole: Ethanol, Methanol
- Ether: ETBE

Im Fall der Realgemische wurde ein marktübliches, DIN EN 228 konformes Benzin ohne Ethanol-Anteil als Basiskraftstoff (KK03) verwendet. Den CFD Surrogaten hingegen diente der PRF95 KK02 (Gemisch aus 95 % vol. Isooktan (PRF100) und 5 % vol. n-Heptan (PRF0)) als Basis.

Abseits eines EN 228 E5 Referenzkraftstoffes (KK01) bzw. des EN 228 E0 Grundkraftstoffes (KK03) sind der Auswahl vier weitere EN 228 konforme Benzine beigefügt, um den Einfluss unterschiedlicher Grundkraftstoffzusammensetzungen zu analysieren. In diesem Zusammenhang stellt KK20 einen EN 228 Kraftstoff maximal zulässigen Aromaten-Gehaltes (35 % vol.) dar und KK21 beinhaltet den nach EN 228 maximal zulässigen Olefin-Gehalt (18 % vol.). KK22 ist demgegenüber ein handelsüblicher E10 Tankstellenkraftstoff.

Ein weiterer EN 228 E5 Kraftstoff (KK33) wurde notwendig, da zu einem späteren Zeitpunkt der Untersuchungen zwei zusätzliche Mischkraftstoffe definiert wurden (KK34, KK35) und die ursprüngliche Kraftstoffbasis KK03 nicht mehr vorrätig war. Ursache der erweiterten Kraftstoffauswahl war die durch Messungen gewonnene Erkenntnis, dass

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Isooktan bzw. Cyclohexan ein äußerst temperatursensitives Selbstzündungsverhalten im Motor aufweisen, welches durch die Kraftstoffe KK34 und KK35 detaillierter analysiert werden sollte. Näheres dazu in Kapitel 6.

Tabelle 13: Kraftstoffauswahl der Untersuchungen.

Kraftstoff	Anteil Grundkraftstoff	Anteil n-Heptan	Anteil Isooktan	ROZ	MOZ	Sensitivität
	[% mol. (vol.)]	[% mol. (vol.)]	[% mol. (vol.)]	[OZ]	[OZ]	[OZ]
E5 EN228 - KK01				97,3	86,1	11,2
PRF95 - KK02		5,6 (5,0)	94,4 (95,0)	95,0	95,0	0,0
E0 EN228 Blendstock - KK03	100,0 (100,0)			95,1	85,3	9,8
Isohexan 19,9 % mol. (16,6 % vol.) - KK04		1,4 (1,3)	78,7 (82,1)	94,9	93,9	1,0
Toluol 20,0 % mol. (14,0 % vol.) - KK06		8,4 (8,1)	71,6 (77,9)	95,1	93,1	2,0
Cyclohexan 19,6 % mol. (13,8 % vol.) - KK07		3,7 (3,6)	76,7 (82,6)	95,3	92,4	2,9
Isohexan 19,8 % mol. (17,2 % vol.) - KK08	18,8 (15,8)	1,0 (1,1)	60,4 (65,9)	95,1	91,9	3,2
n-Hexen 19,1 % mol. (15,5 % vol.) - KK09		2,8 (2,6)	78,1 (81,9)	94,8	90,9	3,9
Toluol 20,0 % mol. (17,1 % vol.) - KK10	75,8 (77,9)	4,2 (5,0)		95,3	84,3	11,0
Cyclohexan 19,5 % mol. (14,5 % vol.) - KK11	22,9 (20,1)	2,2 (2,2)	55,4 (63,2)	95,2	89,6	5,6
Ethanol 19,4 % mol. (7,9 % vol.) - KK12		9,9 (10,2)	70,0 (81,9)	95,6	93,3	2,3
Methanol 19,4 % mol. (5,9 % vol.) ETBE 19,4 % mol. (20,2 % vol.) - KK13		14,7 (16,2)	46,5 (57,7)	95,3	90,6	4,7
ETBE 19,2 % mol. (16,9 % vol.) - KK14		12,4 (11,5)	68,4 (71,6)	95,5	92,6	2,9
Ethanol 19,8 % mol. (10,1 % vol.) - KK15	76,8 (85,5)	3,4 (4,4)		95,2	84,3	10,9
Methanol 19,9 % mol. (7,3 % vol.) - KK16	77,5 (89,3)	2,6 (3,4)		95,3	83,9	11,4
ETBE 19,5 % mol. (20,7 % vol.) - KK17	73,4 (71,4)	7,1 (7,9)		95,4	86,0	9,4
Ethanol 39,1 % mol. (22,4 % vol.) - KK18	53,7 (67,1)	7,3 (10,5)		95,6	84,2	11,4
Methanol 39,4 % mol. (16,9 % vol.) - KK19	55,0 (74,3)	5,6 (8,7)		94,9	83,2	11,7
E5 EN228, Aromaten 35 % vol. - KK20				95,4	84,0	11,4
E5 EN228, Olefine 18 % vol. - KK21				95,3	85,0	10,3
E10 EN228 - KK22				97,0	85,9	11,1
Isohexan 20,0 % mol. (20,6 % vol.) - KK25	80,0 (79,4)			92,9	84,1	8,8
n-Hexen 20,0 % mol. (20,1 % vol.) - KK26	80,0 (79,9)			92,0	80,8	11,2
Toluol 20,0 % mol. (17,3 % vol.) - KK27	80,0 (82,7)			97,8	86,6	11,2
Cyclohexan 20,0 % mol. (17,5 % vol.) - KK28	80,0 (82,5)			93,5	83,0	10,5
Ethanol 20,0 % mol. (10,3 % vol.) - KK29	80,0 (89,7)			98,0	86,4	11,6
Methanol 20,0 % mol. (7,3 % vol.) - KK30	80,0 (92,7)			97,1	85,6	11,5
Ethanol 40,0 % mol. (23,4 % vol.) - KK31	60,0 (76,6)			100,4	87,5	12,9
Methanol 40,0 % mol. (17,5 % vol.) - KK32	60,0 (82,5)			99,1	86,0	13,1
E5 EN228 Blendstock 2 - KK33	100,0 (100,0)			95,6	85,6	10,0
Toluol 14,0 % mol. (12,1 % vol.) Cyclohexan 17,4 % mol. (15,3 % vol.) - KK34	68,6 (72,7)			94,9	83,4	11,5
Isooktan 20,0 % mol. (24,1 % vol.) - KK35	80,0 (75,9)			96,8	87,5	9,3

Anmerkung: KK34 und KK35 basieren auf KK33

EN228 konforme Benzin (KK01, KK03, KK20-22, KK33)
Match Blends (KK08-11, KK15-19, KK34)
Splash Blends (KK25-32, KK35)
CFD Surrogate (KK02, KK04-07, KK09, KK12-14)

Hinsichtlich der Realmischungen ist zwischen Match Blend und Splash Blend zu unterscheiden. Ein Splash Blend beschreibt einen Kraftstoff, welchem die zu untersuchende Komponente ohne weiteres Zutun beigemengt wird. Hierbei kann es zu signifikanten Änderungen der ROZ kommen. Bei einem Match Blend wird dieser Änderung entgegengewirkt, um die ROZ auf einen definierten Wert zu „matchen“. Im Fall der vorliegenden Arbeit wurde eine Ziel-ROZ von 95 definiert. Als Match-Komponenten

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

dienten die Reinstoffe n-Heptan (OZ0) bzw. Isooktan (OZ100). Der Mischungsprozess der Kraftstoffe wird anhand der folgenden Abbildungen verdeutlicht.

In Abbildung 4-1 ist zunächst die Zusammensetzung des Splash bzw. Match Blends auf Basis der Isohexan-Kraftstoffe zu sehen.

Anhand des linken Balkens ist zu erkennen, dass der Splash Blend infolge der Beimischung von 20 % mol. Isohexan ein molares Basiskraftstoff/Komponenten-Verhältnis von 80/20 aufweist. Durch die Zugabe von Isohexan reduziert sich die ROZ des Gemisches auf 92,9. Mit dem Ziel der Darstellung eines ROZ95 Match Blends wurde die Zugabe von 60 % mol. Isooktan (ROZ100) notwendig, um die Klopffestigkeit auf den definierten Zielwert anzuheben. Der geringfügige n-Heptan-Anteil (1 % mol.) ergibt sich durch eine finale Feinjustierung der Klopffestigkeit.

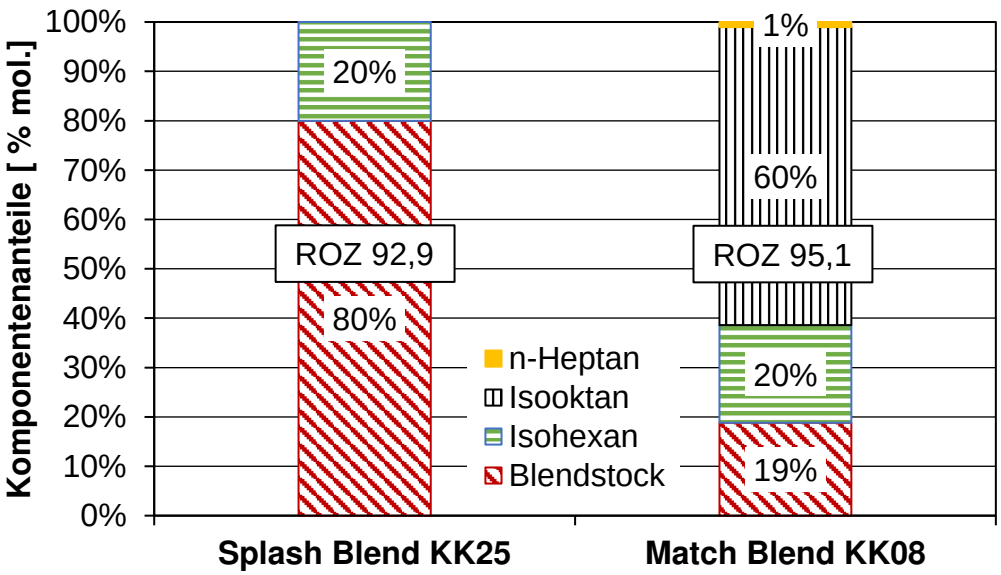


Abbildung 4-1: Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK25 und KK08.

Inwiefern sich die Kraftstoffanteile des Match Blends bei jenen Komponenten darstellt, welche zu einer Klopffestigkeit > ROZ95 im Splash Blend führen ist in Abbildung 4-2 ersichtlich.

Toluol bewirkt in diesem Beispiel eine signifikante Anhebung der Klopffestigkeit von KK27. Durch Zugabe von 4 % mol. n-Heptan kann die ROZ auf 95,3 reduziert werden. Isooktan ist hierbei nicht notwendig.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

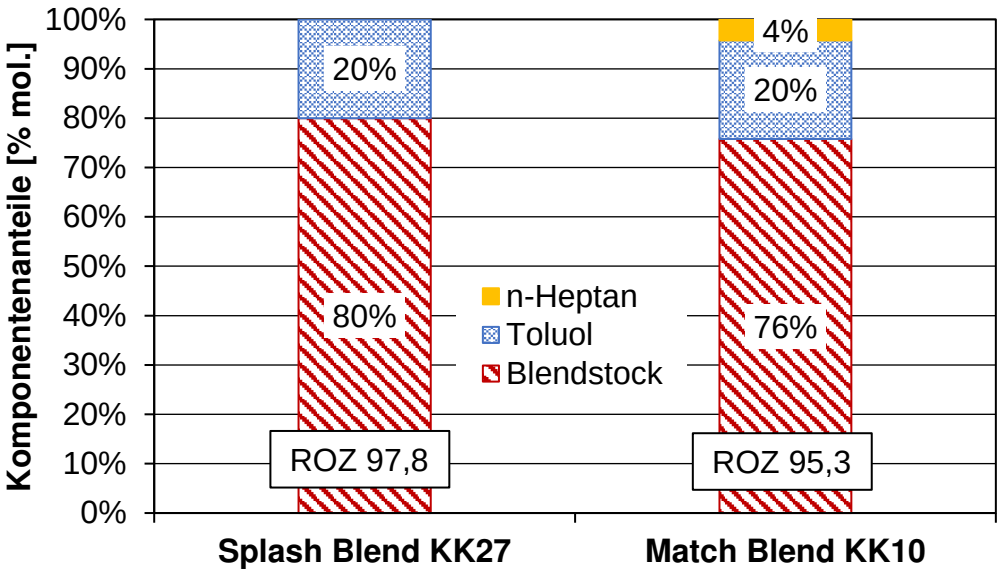


Abbildung 4-2: Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK27 und KK10

Zuletzt zeigt Abbildung 4-3 die Komponentenzusammensetzung des Isohexan bzw. des Toluol CFD Surrogates.

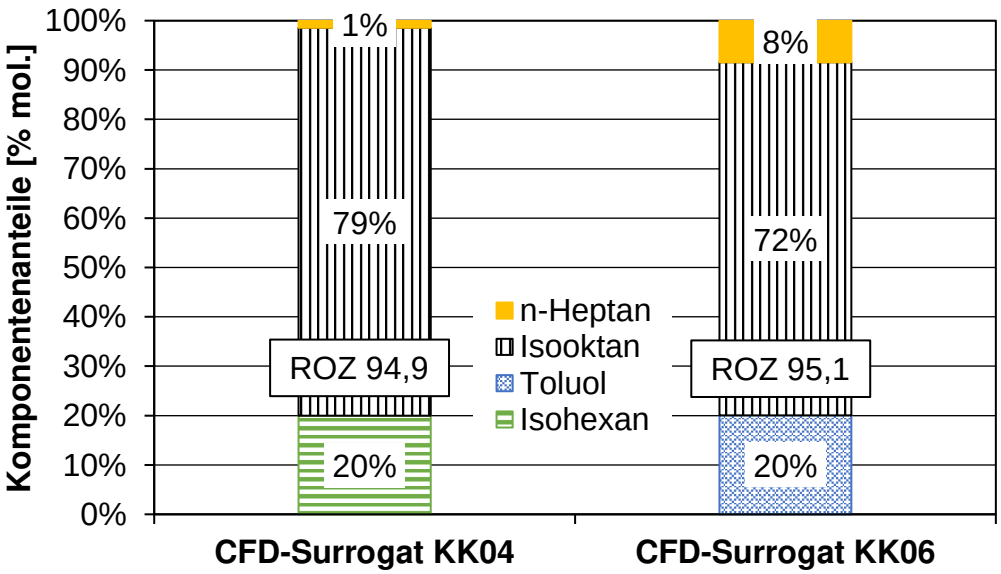


Abbildung 4-3: Molare Zusammensetzung der CFD Surrogate KK04 und KK06.

Wie bereits zuvor erwähnt führt Isohexan zu einer deutlichen Reduktion der Klopffestigkeit des Basiskraftstoffes. Dementsprechend hat das CFD Surrogat KK04 ein sehr hohes Isooktan/n-Heptan Verhältnis, um ROZ95 zu erreichen. Anders zeigt es sich im Fall von Toluol. Durch dessen hohe Klopffestigkeit ist ein signifikant höherer n-Heptan-Anteil im CFD Surrogat notwendig und das Isooktan/n-Heptan-Verhältnis ist bei KK06 deutlich reduziert.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Um die Komplexität der Kraftstoffmatrix zu unterstreichen, ist nachfolgend das Siedeverhalten der Kraftstoffe dargestellt. Abbildung 4-4 lässt eine überaus unterschiedliche Siedecharakteristik der Proben erkennen. Es fällt sofort auf, dass die CFD Surrogate (KK02, KK04-07, KK12-14) ein von Realgemischen deutlich abweichendes Siedeverhalten zeigen. So verdampfen bei diesen infolge der geringen Komponentenanzahl bereits über 90 % vol. des Kraftstoffes bei 100 °C.

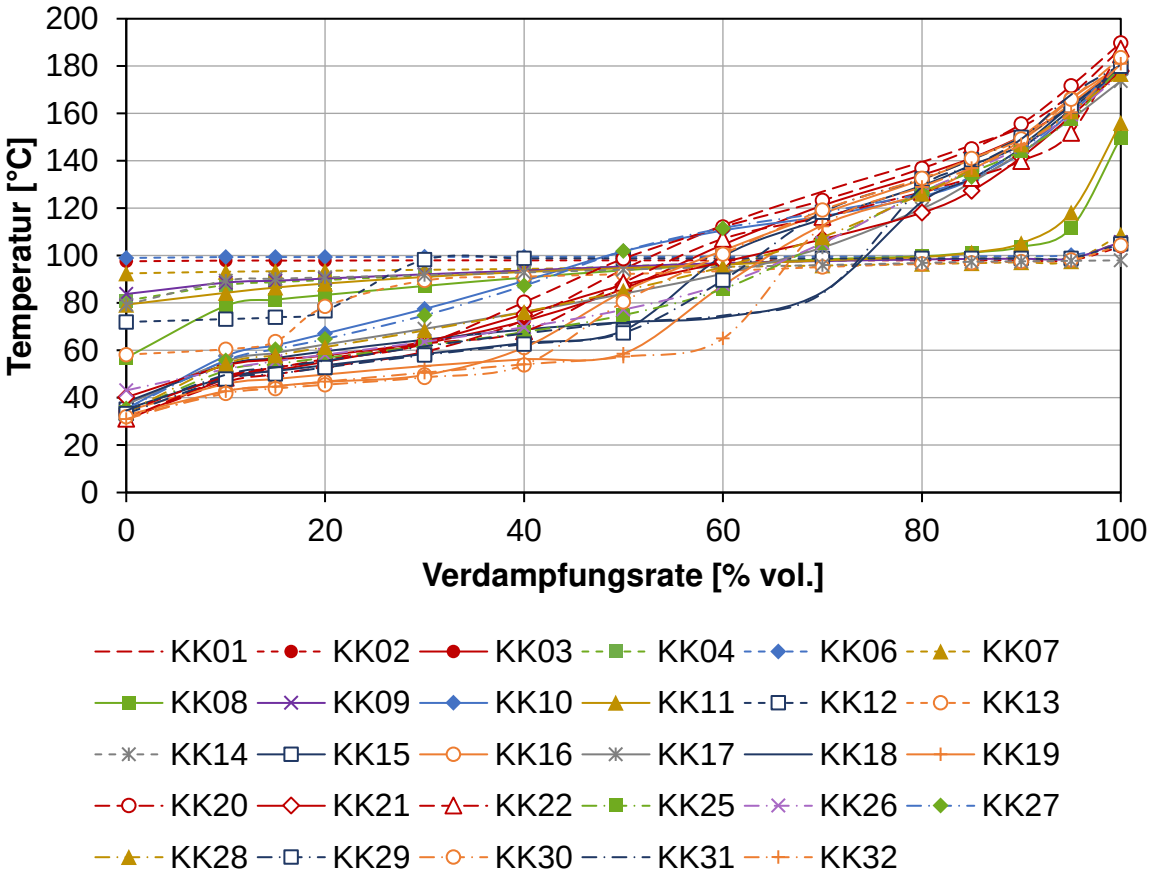


Abbildung 4-4: Siedeverlauf der untersuchten Kraftstoffe (mit Ausnahme KK33-35).

Zuletzt ist in Abbildung 4-5 der Streubereich der ROZ und MOZ der Kraftstoffe dargestellt bzw. ist daraus die signifikant unterschiedliche Sensitivität (ROZ - MOZ) abzuleiten. Definitionsgemäß sind die Kraftstoffe hoher Isooktan- bzw. n-Heptan-Anteile (vornehmlich CFD Surrogate) jene Kraftstoffe, welche eine äußerst geringe Sensitivität aufweisen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

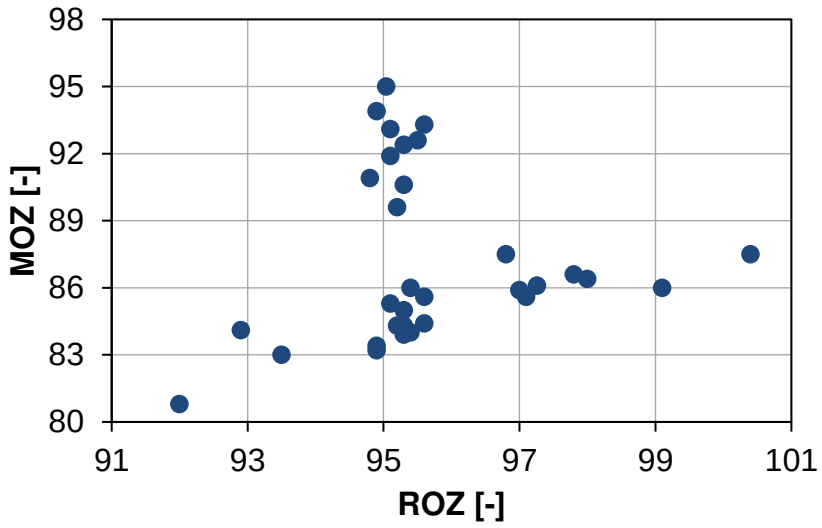


Abbildung 4-5: ROZ/MOZ-Verteilung der untersuchten Kraftstoffmatrix (Basis: KK01 bis KK35).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

5 Ergebnisse und Diskussion

5.1 Kraftstoffbewertung am Einhubtriebwerk auf Basis der Zündverzugszeit

Auf Basis der RCM-Resultate seitens PCFC kann das komplexe Zündverhalten der Kraftstoffe grundlegend analysiert werden um maßgebliche Zündregime abzuleiten, welche zu einer irregulären Verbrennung führen.

Nachfolgende Abbildung 5-1 beinhaltet das Ergebnis der Zündverzugsanalysen von 15 unterschiedlichen ROZ95 Kraftstoffen der untersuchten Kraftstoffmatrix. Der graue Bereich kennzeichnet den Streubereich aller analysierten ROZ95-Proben. Die NTK-Charakteristik der Kraftstoffe wird im Bereich zwischen 450 bis 560 °C (ca. 1,4 bis 1,2 inverser Temperatur) anhand der ansteigenden Zündverzugszeit, trotz zunehmender Temperatur, verdeutlicht.

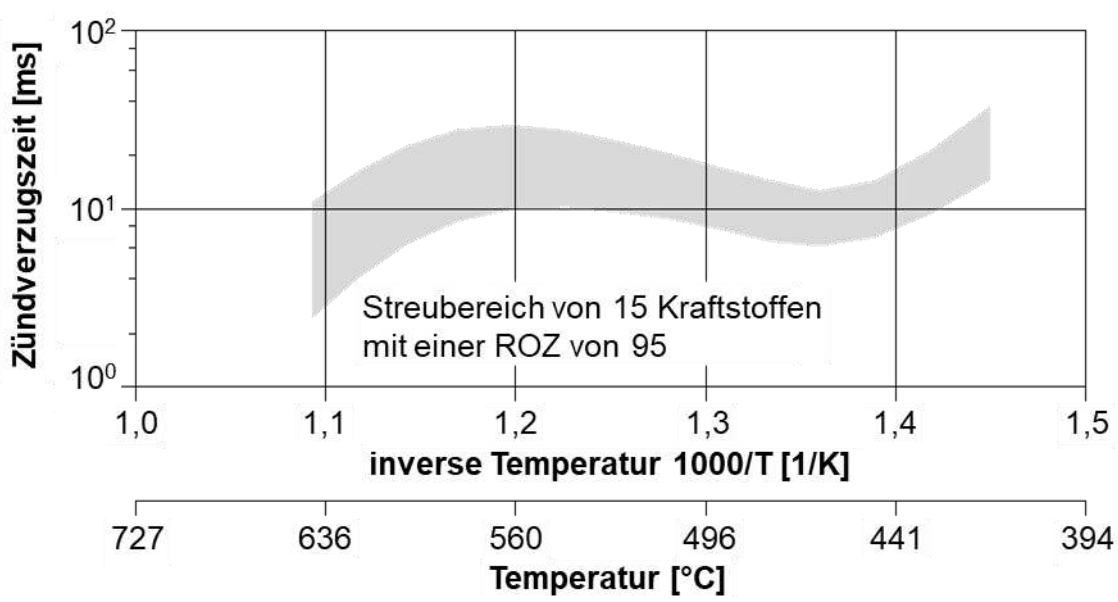


Abbildung 5-1: Streubereich der Zündverzugszeitmessungen von 15 Kraftstoffen ähnlicher Klopffestigkeit (ROZ95). Messung unter stöchiometrischen Luft-Kraftstoff-Verhältnis bei 20 bar Kompressionsenddruck [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Interessant ist in diesem Zusammenhang, dass die Zündverzugszeiten der ROZ95-Proben trotz vergleichbarer Klopffestigkeit signifikant streuen. Die deutliche Abweichung der Reaktivität im Einhubtriebwerk lässt bereits eine unterschiedliche Selbstzündungsneigung der Kraftstoffe im motorischen Betrieb erwarten und eine lediglich begrenzte Gültigkeit der ROZ ableiten.

Abbildung 5-2 zeigt den Vergleich vier exemplarischer Kraftstoffproben, um die Relevanz der Zündverzugscharakteristik hervorzuheben. Die Darstellung umfasst den PRF95 Basiskraftstoff (95 % vol. Isooktan und 5 % vol. n-Heptan) (KK02) mit ausgeprägtem NTK-Verhalten sowie einen 3-Komponenten-Kraftstoff (KK09). Zusätzlich sind zwei Splash Blends (KK27 und KK32) aufgetragen um ebenfalls den Einfluss einer Komponente bei sonst gleicher Realkraftstoffbasis (KK03) hervorzuheben.

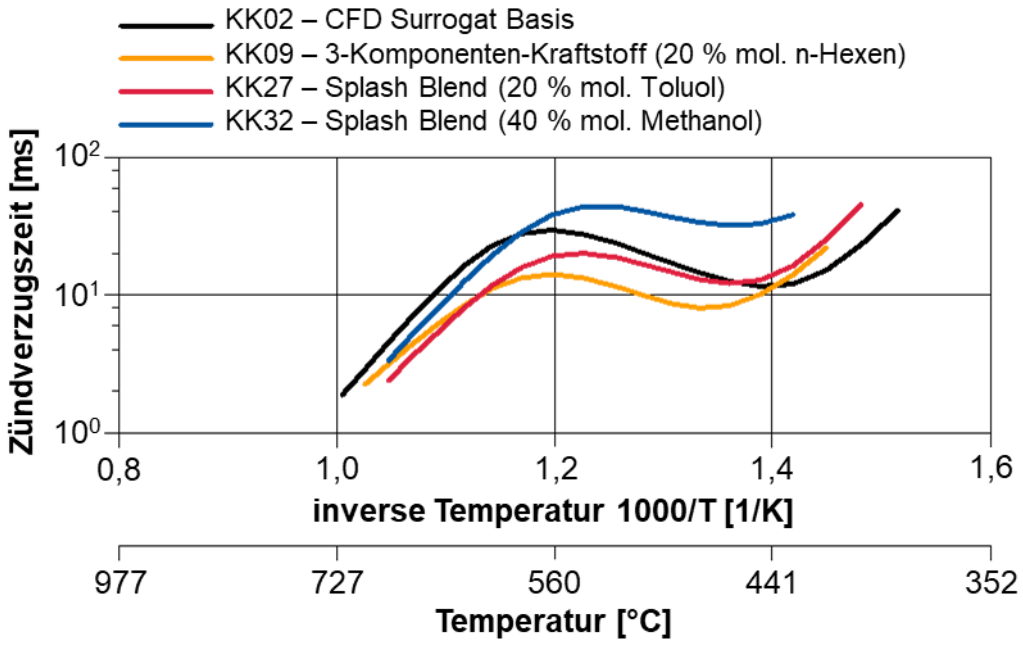


Abbildung 5-2: Zündverzugszeitanalysen ausgewählter Kraftstoffe, gemessen am Einhubtriebwerk unter stöchiometrischen Bedingungen bei 20 bar Kompressionsendruck [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Bei detaillierter Betrachtung der Zündverzugscharakteristik dieser Proben ist folgendes festzuhalten:

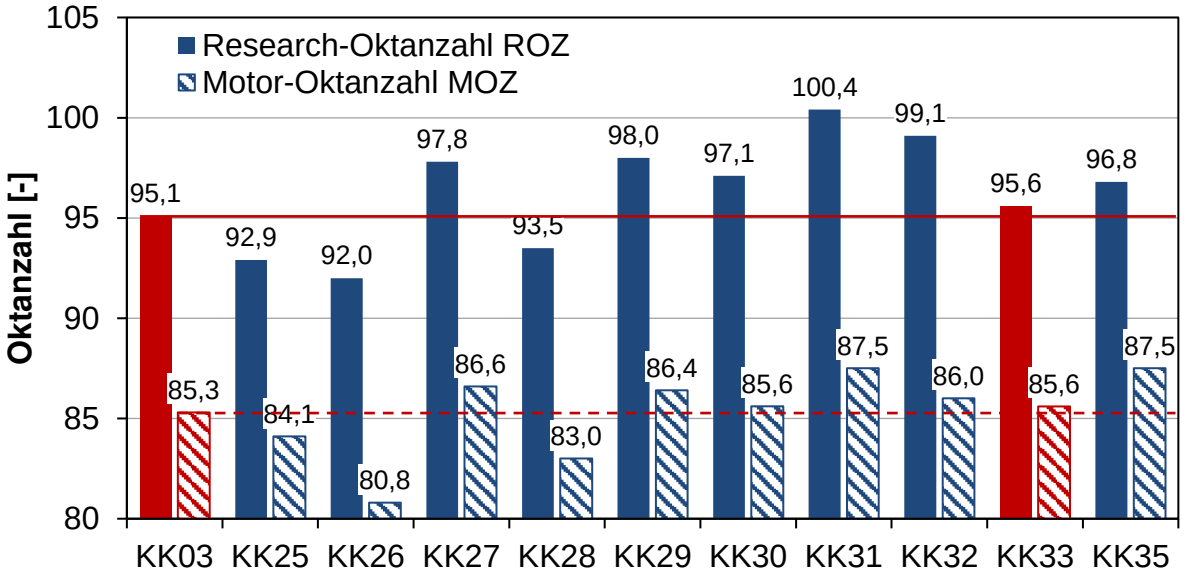
- Je nach Temperaturbereich zeigen die Kraftstoffe unterschiedliche Selbstzündungstendenzen. So ist im Bereich < 440 °C der Kraftstoff KK02 (schwarze Linie) die reaktivste Probe wogegen im Bereich > 600 °C dieser den Kraftstoff geringster Selbstzündungsneigung darstellt. Dieses Ergebnis deckt sich mit den Erkenntnissen aus [114], wonach PRFs (KK02 ist ein ebensolcher) im Bereich geringerer Temperaturen reaktiver sind als konventionelle Ottokraftstoffe.
- Durch die Änderung lediglich einer Komponente (Vergleich der Splash Blends KK27 (rot) und KK32 (blau)) kommt es zu einer signifikanten Änderung der Zündverzugscharakteristik im gesamten untersuchten Temperaturbereich.
- Kraftstoffe hohen Isooktan- bzw. n-Heptan-Gehaltes (KK02 und KK09) weisen ein ausgeprägtes NTK-Verhalten auf [101].

Mit dem Ziel der **Entwicklung eines komponentenunabhängigen Bewertungsverfahrens zur Charakterisierung des kraftstoffspezifischen Selbstzündungsverhaltens** untermalt das vorliegende Ergebnis die **Notwendigkeit vergleichbarer thermodynamischer Randbedingungen** des potenziellen Prüfverfahrens zu motorelevanten Betriebsbereichen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

5.2 Kraftstoffbewertung am modifizierten DE-CFR-Prüfmotor

Abbildung 5-3 zeigt das Ergebnis der ROZ- und MOZ-Kraftstoffbewertung am genormten CFR-Prüfmotor.



Nr.	Kraftstoff	Mischung
KK03	E0 EN 228	Blendstock (Referenz für KK25-32)
KK25	20 % mol. Isohexan	Splash Blend
KK26	20 % mol. n-Hexen	Splash Blend
KK27	20 % mol. Toluol	Splash Blend
KK28	20 % mol. Cyclohexan	Splash Blend
KK29	20 % mol. Ethanol	Splash Blend
KK30	20 % mol. Methanol	Splash Blend
KK31	40 % mol. Ethanol	Splash Blend
KK32	40 % mol. Methanol	Splash Blend
KK33	E5 EN 228	Blendstock (Referenz für KK35)
KK35	20 % mol. Isooktan	Splash Blend

Abbildung 5-3: ROZ- und MOZ-Bewertung der Splash Blend Kraftstoffe. KK03 ist Basiskraftstoff von KK25-32. KK33 ist Basiskraftstoff der Probe KK35. Die Basiskraftstoffe sind jeweils rot gekennzeichnet.

Die in dieser und den folgenden Abbildungen des Kapitels 5.2 dargestellten Ergebnisse umfassen lediglich die Splash Blend Kraftstoffe (KK25-32, KK35), da auf Basis dieser eine komponentenspezifische Bewertung durchführbar ist. Um die Auswirkung des jeweils zugemischten Kohlenwasserstoffes zu verdeutlichen, wird auf den Basiskraftstoff KK03 bzw. im Fall von KK35 auf den Basiskraftstoff KK33 referenziert.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Die Analyse der genormten Kraftstoffkennzahlen ROZ und MOZ, gemessen an einem normgerechten CFR-Aggregat, bescheinigt dem Olefin n-Hexen (KK26) die höchste Klopfneigung (geringste Klopffestigkeit) der untersuchten Komponenten. Im speziellen die MOZ erfährt gegenüber der ROZ eine stärkere Reduktion, wodurch die Sensitivität des Kraftstoffes angehoben wird; zu sehen in Abbildung 5-4. Dieses Verhalten ist zu erwarten, da Olefine nach [101] kein NTK-Verhalten beobachten lassen und dies nach [114] in einer erhöhten Sensitivität der Kraftstoffe resultiert.

Demgegenüber zeigen die Alkohole Ethanol (KK29, KK31) bzw. Methanol (KK30, KK32) eine signifikant gesteigerte Selbstzündungsresistenz. In diesem Fall erfährt die ROZ eine gegenüber der MOZ stärkere Anhebung, wodurch in Summe ebenfalls bei Alkoholen eine erhöhte Kraftstoffsensitivität auszumachen ist.

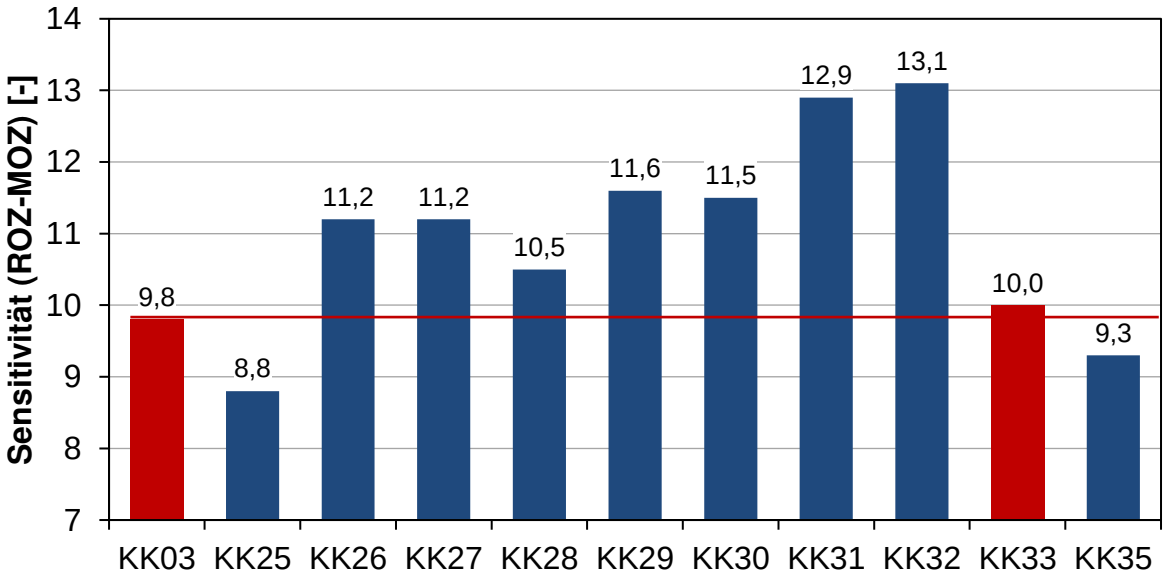


Abbildung 5-4: Einfluss der untersuchten Kraftstoffkomponenten auf die Sensitivität (ROZ - MOZ) der Basiskraftstoffe KK03 bzw. KK33 (rote Balken). Bewertung basierend auf den Splash Blend Mischungen.

Abseits der alkoholischen Komponenten ist auch beim Aromat Toluol (KK27) unter molar gleicher Beimischung eine äquivalent hohe Klopffestigkeit wie bei Ethanol festzustellen. Die Sensitivität ist, aufgrund des fehlenden NTK-Verhaltens der Aromaten [101] ebenfalls erhöht.

Alkane (Paraffine) zeigen im Unterschied zu den eben beschriebenen Komponenten gemäß [101] eine ausgeprägte NTK-Charakteristik. Dies führt infolge zu einer reduzierten Sensitivität von KK25 (Isohexan) und KK35 (Isooktan).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Inwiefern sich die kraftstoffspezifische Reaktivität in den am modifizierten DE-CFR-Motor gemessenen Kennzahlen widerspiegelt, wird in Abbildung 5-5 bzw. Abbildung 5-6 dargestellt.

Hinsichtlich der Selbstzündungsreihenfolge der Kraftstoffe sind bei den DOZ-Daten in Abbildung 5-5 keine signifikanten Unterschiede zu den Erkenntnissen aus der ROZ-Analyse festzustellen. Lediglich die Reaktivität des Basiskraftstoffes KK33 und des darauf basierenden Splash Blends KK35 ist in Relation zu KK03 deutlich reduziert. Dieses Verhalten ist bei der ROZ nicht zu erkennen. Die Ursache dessen liegt in der deutlich voneinander abweichenden Grundkraftstoffzusammensetzung vermutet. Eine Analyse dieser lässt im Fall von KK03 untere anderem einen 10 % vol. höheren Anteil kurzkettiger Paraffine gegenüber KK33 erkennen.

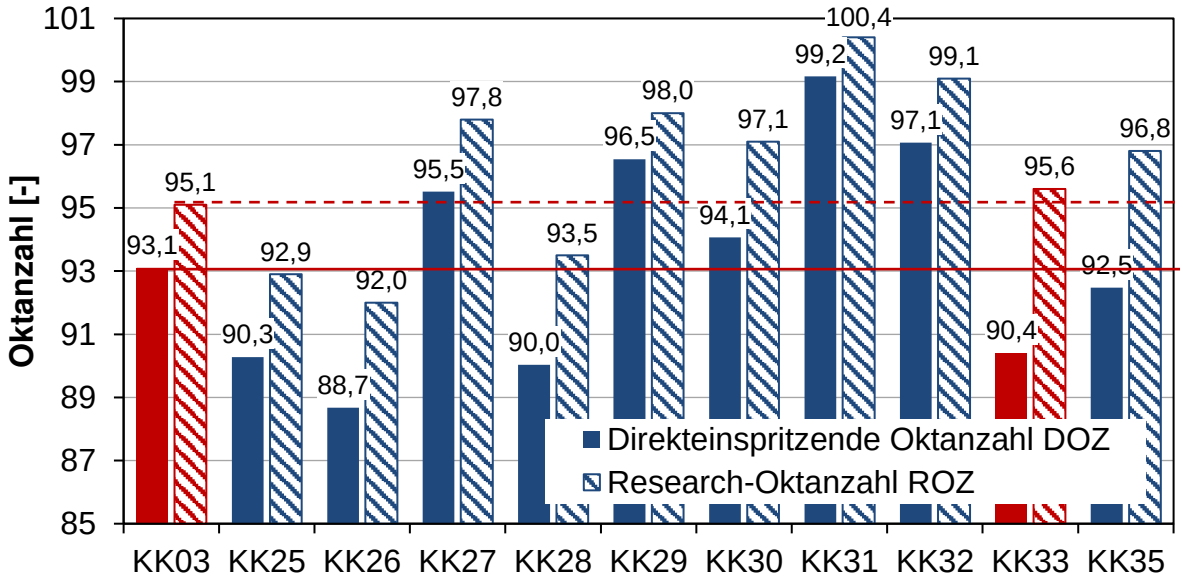


Abbildung 5-5: DOZ- und ROZ-Bewertung der Splash Blend Kraftstoffe. KK03 ist Basiskraftstoff von KK25-32. KK33 ist Basiskraftstoff der Probe KK35. Die Basiskraftstoffe sind jeweils rot gekennzeichnet.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

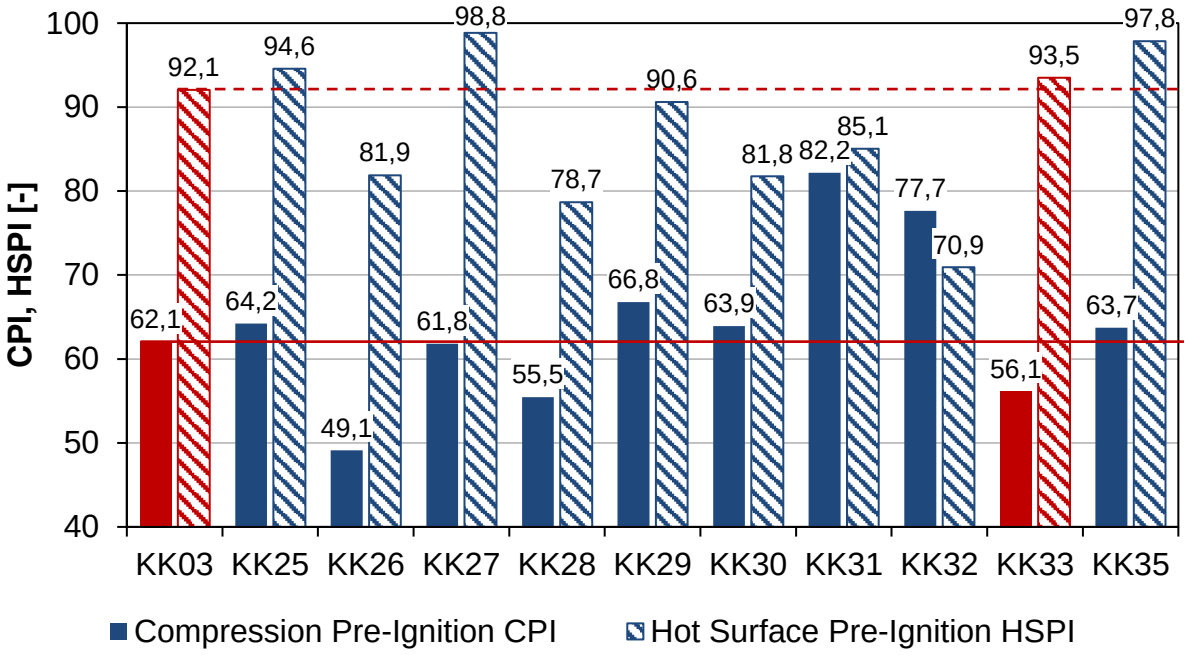


Abbildung 5-6: CPI und HSPI Bewertung der Splash Blend Kraftstoffe. KK03 ist Basiskraftstoff von KK25-32. KK33 ist Basiskraftstoff der Probe KK35. Die Basiskraftstoffe sind jeweils rot gekennzeichnet.

Im Fall der Gasphasenzündung (CPI, Abbildung 5-6) am DE-CFR-Motor ist erneut n-Hexen (KK26) die kritischste Probe. Die Alkohole (KK29-32) lassen auch in dieser Bewertungsmethodik einen positiven Effekt auf die Kraftstoffperformance beobachten. Das Aromat Toluol zeigt bei der CPI ein vergleichbar reaktives Verhalten wie die Basis KK03. Dies ist durchaus überraschend, da Toluol grundsätzlich für sein klopfresistentes (selbstzündungsresistentes) Verhalten bekannt ist.

Bei Betrachtung der Glühzündungsneigung (HSPI) in Abbildung 5-6 ist insbesondere bei den Alkoholen (KK29-32) eine der CPI abweichende Zündreihenfolge erkennbar. Infolge der Beimengung einer Alkoholkomponente wird die Selbstzündungsneigung an einer heißen Oberfläche im modifizierten DE-CFR-Aggregat signifikant gesteigert. Vor allem Methanol lässt bei 20 % mol. ein ähnlich geringes Glühzündungsniveau wie n-Hexen beobachten. Des Weiteren ist bei der HSPI die Komponente Cylcohexan (KK28) als die Kritischste zu identifizieren. Die Paraffine Isohexan (KK25) und Isooktan (KK35) sowie Toluol (KK27) zeigen demgegenüber eine reduzierte Glühzündungsreaktivität.

Tabelle 14 gibt auf Basis der vorgestellten Splash Blend Resultate eine Übersicht der Komponenteneinflüsse auf das entsprechende Prüfverfahren.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Tabelle 14: Bewertungsmatrix der Kraftstoffkomponenteneinflüsse auf Basis der relevanten Kraftstoffkennzahlen. Grundlage der Bewertung bilden die Splash Blend Proben. Diese werden auf den Basiskraftstoff KK03 bzw. bei Isooktan auf den Grundkraftstoff KK33 referenziert. Ein Plus (+) beschreibt für die Komponente einen positiven (resistenteren) Verbrennungseinfluss.

Stoffgruppe	Komponente	ROZ	MOZ	Sensitivität*	DOZ	CPI	HSPI
Paraffin	Isohexan	--	-	-	-	+	+
	Isooktan	+	++	-	+	+	++
Naphthen	Cyclohexan	--	--	+	--	--	--
Olefin	n-Hexen	--	--	++	--	--	--
Aromat	Toluol	++	++	++	+	o	++
Oxygenat	Ethanol	++	+	++	++	++	-
	Methanol	++	+	++	+	+	--
Referenz KK03		++/-- Δ ≥ 1,3 OZ +/- Δ ≥ 0,3 OZ			++/-- Δ ≥ 3 Einheiten +/- Δ ≥ 1 Einheit		

*+/- beschreibt lediglich eine Erhöhung (+)/Reduktion (-) der Sensitivität, keine Wertung!

Folgende wesentliche Ergebnisse sind festzuhalten:

- Lediglich die Paraffine Isohexan und Isooktan reduzieren infolge deren ausgeprägten NTK-Verhaltens die Sensitivität der Basiskraftstoffe.
- Betreffend die Selbstzündungsreihenfolge der Kraftstoffe ist mit Ausnahme des Basiskraftstoffes KK33 und dessen Isooktan Splash Blend KK35, zwischen ROZ und DOZ kein signifikanter Unterschied festzustellen.
- Alkohole zeigen je nach Selbstzündungsquelle eine abweichende Charakteristik. Im Fall der oberflächeninduzierten VE (HSPI) führen Alkohole zu einem reaktiveren Verhalten. Betrachtet man die Selbstzündungsneigung infolge einer kritischen Gasphase (CPI) so resultiert der Alkohol-Anteil im Kraftstoff in einer signifikant reduzierten Reaktivität.

Bei den dargestellten Ergebnissen ist zu berücksichtigen, dass die Selbstzündungscharakteristik der einzelnen Kraftstoffe von den Betriebsrandbedingungen und somit vom Prüfverfahren abhängig ist. Die Übertragbarkeit auf ein modernes Brennverfahren wird in den nachfolgenden Kapiteln anhand des Dreizylinder-Serienaggregates bzw. den Ergebnissen am Einzylinder-Forschungsmotor der RWTH Aachen University validiert.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Die der Arbeit zugrunde liegenden DOZ-, CPI- und HSPI-Daten wurden aus jeweils mindestens drei Messungen eines Kraftstoffes gemittelt. Tabelle 15 gibt eine Übersicht der über alle Kraftstoffe gemittelten Messtoleranz (35 Proben multipliziert mit min. 3 Messungen) der einzelnen Verfahren. Die Vergleichbarkeit der ROZ und MOZ wurde den Normen [99], [100] entnommen. Es ist anzumerken, dass die angegebenen Toleranzen keine Allgemeingültigkeit besitzen, da eine statistisch belastbare Bewertung der Messtoleranz der DOZ, CPI und HSPI im Zuge dieser Dissertation nicht durchgeführt wurde.

Tabelle 15: Gemittelte Messtoleranzen des DOZ-, CPI- und HSPI-Verfahrens. Mittelungen basierend auf 35 Kraftstoffen (min. 3 Messung je Kraftstoff). ROZ und MOZ Vergleichbarkeitswerte aus [99], [100].

ROZ, MOZ Vergleichbarkeit laut [100], [101]		**gültiger Messbereich**
ROZ	0,7	90 bis 100
MOZ	0,9	80 bis 90

DE-CFR-Motor-Prüfverfahren	**gemittelte Messtoleranz über 35 Kraftstoffe** (min. 3 Messungen je Kraftstoff)	**Wertebereich der untersuchten Proben**
DOZ	1,2	88,7 bis 101,2
CPI	3,7	49,1 bis 93,3
HSPI	10,4	65,6 bis 100,9

Die hohe Messtoleranz der CPI ist zu relativieren da deren Messbereich signifikant größer ist als jener der restlichen Methoden; siehe Tabelle 16. Einzig die HSPI lässt eine überaus hohe Messungenauigkeit erkennen. Die hohe Toleranz beruht unter anderem auf der Schwierigkeit der Regelung einer konstanten Glühstifttemperatur unter motorischen Quereinflüssen (Strömung, Gemischverdampfung), sowie der anschließenden Berechnungsmethodik der HSPI. In Gleichung 3-3 resultiert eine um 2 °C höhere Glühstifttemperatur in einem HSPI-Anstieg von 1.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Tabelle 16: Maximale Differenz der ermittelten Kennzahlen basierend auf der gesamten Kraftstoffmatrix (35 Proben).

Prüfverfahren	Maximale Differenz der ermittelten Kennzahlen (Δ max-min)
ROZ	8,4
MOZ	14,2
DOZ	12,5
CPI	44,2
HSPI	35,3

5.3 Kraftstoffbewertung am modernen Verbrennungsmotor

Im folgenden Kapitel wird das Verbrennungsverhalten der Kraftstoffe auf Basis des Einzylinder-Forschungsmotors der RWTH Aachen University [7] sowie dem Dreizylinder-Serienmotor betrachtet. Da eine detaillierte Analyse von mehr als 30 Kraftstoffen an dieser Stelle zu umfangreich wäre, werden lediglich ausgewählte Proben im Text detailliert analysiert.

5.3.1 Gasphasenvorentflammung

Die kraftstoffspezifische Selbstzündungsneigung infolge einer kritischen Gasphase wird anhand der Ergebnisse am Einzylinder-Forschungsmotor erläutert [7]. Anschließend erfolgt ein Vergleich der Ergebnisse des Einzylinder-Aggregates mit jenen des Dreizylinder-Serienmotors, um den Einfluss der unterschiedlichen Versuchsträger bzw. Versuchsmethoden (Druckvariation gegenüber Temperaturvariation) zu analysieren.

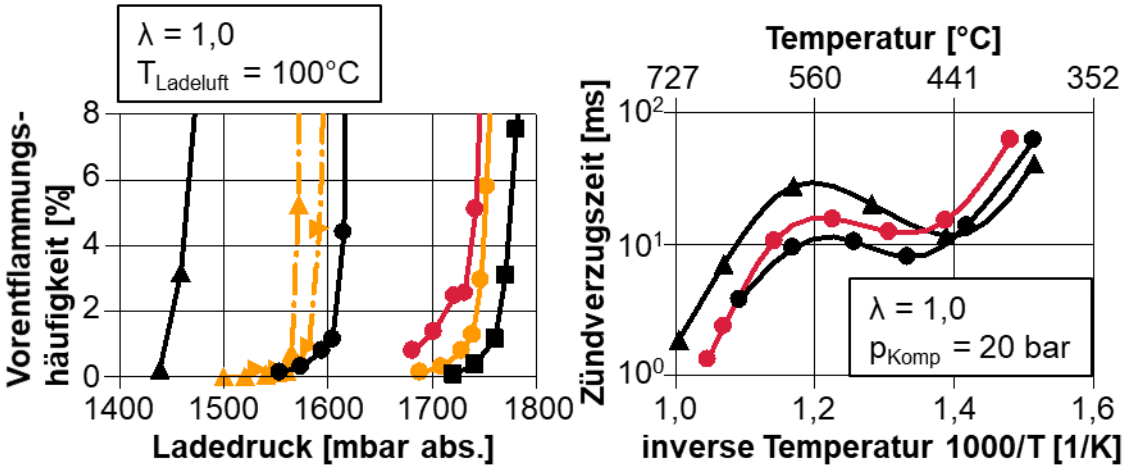
In Abbildung 5-7 ist das Vorentflammungsverhalten der EN 228 konformen Tankstelllenkraftstoffe KK01, KK03 und KK20 bis KK22, aufgezeigt. Zur Analyse der Kraftstoffperformance wird die kraftstoffspezifische Vorentflammungshäufigkeit über das variable Ladedruckniveau des Motors bewertet. Entsprechend der Messmethodik in Kapitel 3.3 wird zur Charakterisierung der kraftstoffspezifischen Vorentflammungsneigung jener Ladedruck herangezogen, welcher zu einer Vorentflammungshäufigkeit von 2% führt (kritischer Ladedruck).

Das Diagramm umfasst zusätzlich den CFD Basiskraftstoff KK02 (PRF95) sowie den Reinstoff Isooktan zur Analyse des n-Heptan-Einflusses in KK02. Die

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Stoffgruppenanteile der einzelnen Proben bzw. die ROZ sind angegeben, um eventuelle Zusammenhänge zur Vorentflammungsneigung erkennen zu lassen.

Auf Basis der ermittelten Zündverzugszeiten von KK01, KK02 und KK03 (im Diagramm rechts) soll Rückschluss auf relevante Reaktionspfade gezogen werden.



	KK	Kraftstoff	Paraffin [% vol.]	Naphthen [% vol.]	Aromat [% vol.]	Olefin [% vol.]	Oxygenat [% vol.]	ROZ
	01	EN 228 E5	44,8	5,7	33,9	6,4	9,2	97,3
	02	PRF95	100	-	-	-	-	95,0
	03	EN 228 E0	52,8	6,0	31,0	6,4	3,9	95,1
	20	EN 228 E5	41,6	5,2	35,1	9,2	8,9	95,4
	21	EN 228 E5	50,1	3,9	20,7	17,6	7,6	95,3
	22	EN 228 E10	45,5	3,7	34,0	7,6	9,3	97,0
		Isooktan	100	-	-	-	-	100

Abbildung 5-7: Gasphasenzündungscharakteristik verschiedener DIN EN 228 konformer Marktkraftstoffe (KK01, KK03, KK20-22) sowie von Isooktan und PRF95 (KK02) [7].

Die untersuchten EN 228 Kraftstoffe lassen einen überaus weiten kritischen Ladedruckbereich erkennen. Die Kraftstoffe KK01 bzw. KK22 weisen innerhalb der EN 228 Proben den höchsten kritischen Ladedruck auf. Dies spiegelt sich ebenfalls in deren ROZ wider. Lediglich Isooktan zeigt sowohl im Einzylinder-Forschungsmotor als auch bei der ROZ ein selbstzündungsresistenteres Verhalten. An dieser Stelle würde sich ein Zusammenhang zur Klopffestigkeit grundsätzlich ableiten lassen; betrachtet man jedoch ausschließlich die ROZ95-Proben KK02, KK03, KK20 und KK21 so ist das deutlich reaktivere Verhalten von KK02 nicht durch die Klopffestigkeit zu erklären.

Auch unter Berücksichtigung der Stoffgruppenanteile Paraffine, Naphthene, Aromaten, Olefine und Oxygenaten ist die Vorentflammungscharakteristik der Proben nicht ableitbar. Im Fall von KK02 und Isooktan ist trotz gleichen Paraffin-Anteiles (100 %) ein

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

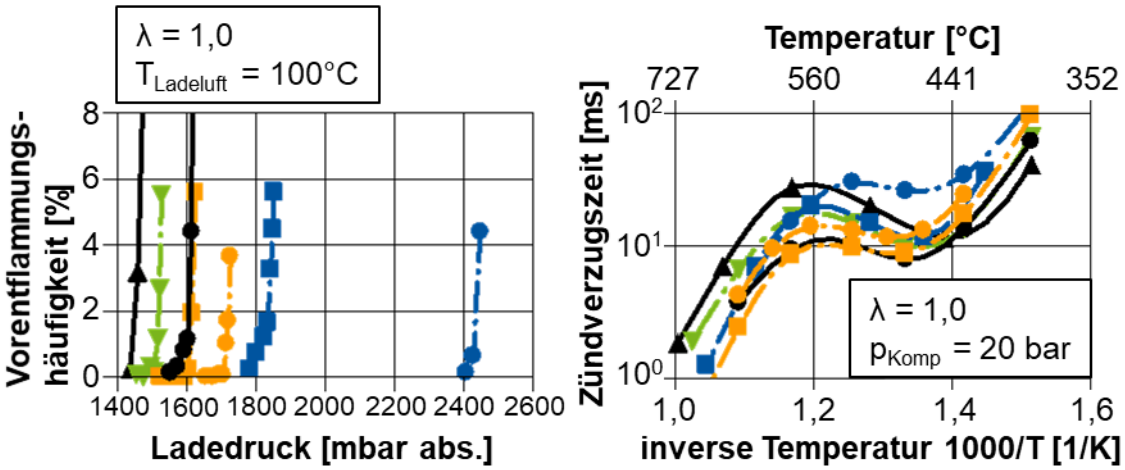
signifikanter Unterschied im kritischen Ladedruck auszumachen. Das Paraffin n-Heptan führt hierbei zu einem deutlich selbstzündungswilligeren Verhalten. Eine abweichende Selbstzündungsreaktivität einzelner Moleküle der gleichen Stoffgruppe wurde bereits in [56] beschrieben.

Ethanol lässt in diesem Zusammenhang ebenfalls keinen Rückschluss auf die Gasphasenzündungsreaktivität zu. So zeigen die E5 Kraftstoffe KK20 und KK21 ein ähnliches Verhalten wie der E0 Kraftstoff KK03. Die E5 Probe KK01 ist signifikant resistenter.

Zusammenfassend ist betreffend die EN 228 konformen Proben an dieser Stelle kein belastbares Kraftstoffranking auf Basis der ROZ oder der Stoffgruppenanteile auszumachen. Hinsichtlich der Zündverzugszeitanalysen sind die Intermediär- bzw. Niedertemperaturoxidationspfade (< 440 °C) als potenziell maßgebende Reaktionspfade abzuleiten. Lediglich in diesem Bereich ist das Kraftstoffranking der Proben KK01, KK02 und KK03 am motorischen Versuchsträger dasselbe wie bei den Zündverzugszeitverläufen.

Im Folgenden wird in Abbildung 5-8 exemplarisch der Einfluss von Ethanol als Beimischkomponente zu den Basiskraftstoffen KK02 bzw. KK03 betrachtet. Eine detaillierte Analyse der übrigen Kohlenwasserstoffe aus Tabelle 13 (Kraftstoffauswahl) gibt [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan [% mol.] ([% vol.])	Isooktan [% mol.] ([% vol.])	ROZ
	02	PRF95	5,6 (5,0)	94,4 (95,0)	95,0
	03	Grundkraftstoff	-	-	95,1
	12	20 % Ethanol CFD	9,9 (10,2)	70,7 (81,9)	95,6
	15	20 % Ethanol MB	3,4 (4,4)	-	95,2
	18	40 % Ethanol MB	7,3 (10,5)	-	95,6
	29	20 % Ethanol SB	-	-	98,0
	31	40 % Ethanol SB	-	-	100,4

Abbildung 5-8: Einfluss von Ethanol auf die Gasphasenzündungsneigung der Grundkraftstoffe KK02 und KK03 [7].

Wie bereits hinreichend bekannt, fungiert Ethanol als sogenannter „Oktan-Booster“ für Ottokraftstoffe [116], [117]. Durch die Zugabe von 20 % mol. (KK29) bzw. 40 % mol. (KK31) Ethanol auf den Basiskraftstoff KK03 ist ein ROZ-Anstieg von 2,9 bzw. 5,3 Oktanzahlen zu verzeichnen. Abseits der hohen Klopffestigkeit der Ethanol Splash Blends ist beim kritischen Ladedruck am Einzylinder-Forschungsmotor ebenfalls ein signifikanter Anstieg (reduzierte Reaktivität) zu erkennen. Das unkritischere Selbstzündungsverhalten ist unter anderem in der hohen Verdampfungsenthalpie des Ethanols begründet und dem damit einhergehenden Kühlungseffekt bei der Kraftstoffeinbringungen im Brennraum. So weist Ethanol nach [118] eine Verdampfungswärme von 839 J/g auf, wogegen typische Ottokraftstoffe nach [23] in einem Bereich von etwa 380-500 J/g liegen.

Bei Betrachtung der Match Blends KK15 und KK18 zeigt sich, dass durch die Zugabe von geringen Mengen n-Heptan die Selbstzündungsneigung der Kraftstoffe signifikant angehoben wird. Die abweichende Vorentflammungscharakteristik der Kraftstoffe ähnlicher ROZ hebt erneut das unzureichende prädiktive Potenzial der ROZ zur Vorentflammungsbewertung hervor.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Hinsichtlich des CFD Kraftstoffes KK12 ist festzustellen, dass dieser ein deutlich kritischeres Verhalten aufweist als der Realkraftstoff gleichen Ethanol-Gehaltes und gleicher ROZ (KK15).

Anhand der RCM-Analysen sind die motorischen Vorentflammungstendenzen erneut im Intermediär- bzw. Niedertemperaturbereich der Oxidation (<440 °C) nachzuvollziehen.

Inwiefern dieses Resultat bzw. die Ergebnisse betreffend alle zu untersuchenden Kraftstoffe auf den Dreizylinder-Serienmotor zu übertragen sind, ist in Abbildung 5-9 dargestellt. CFD Surrogate sowie KK31 (40 % mol. Ethanol Splash Blend) sind in dieser Analyse nicht berücksichtigt, da deren Untersuchung aufgrund limitierter Kraftstoffmengen am Dreizylinder-Motor nicht durchgeführt waren.

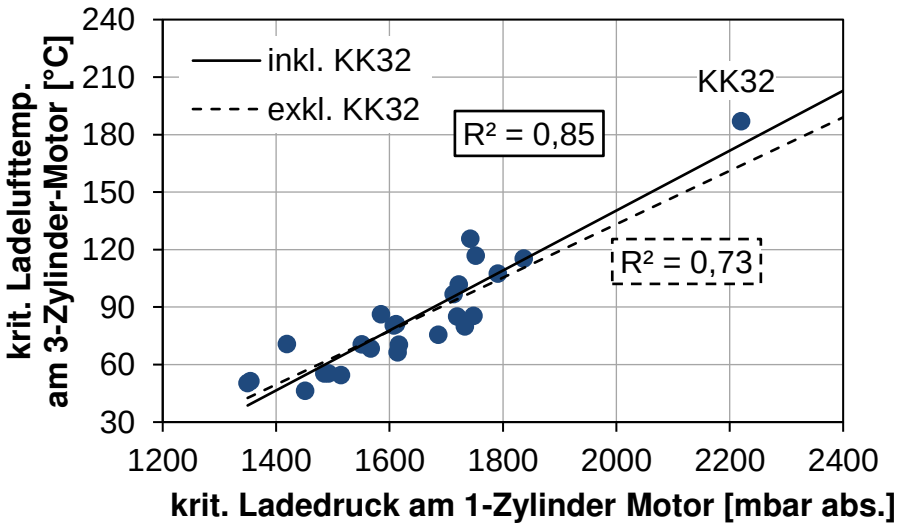


Abbildung 5-9: Korrelation des kritischen Laderdruckes gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor und der kritischen Ladelufttemperatur gemessen am Dreizylinder-Serienaggregat.

Hinsichtlich der Vorentflammungstendenzen auf den unterschiedlichen Versuchsträgern lässt sich trotz abweichender Messmethodik eine sehr hohe Übereinstimmung ablesen. Berücksichtigt man den selbstzündungsresistenten Kraftstoff KK32 (40 % mol. Ethanol) in dieser Analyse nicht, so zeigt sich mit einem Bestimmtheitsmaß von 73% weiterhin eine hohe Übertragbarkeit der Ergebnisse. Dieses Resultat unterstreicht die Notwendigkeit und das vorhandene Potenzial einer Kraftstoffcharakterisierung zur Bewertung der VE-Neigung im Betrieb moderner Motoren.

Tabelle 17 stellt die Vorentflammungsneigung aller untersuchten Komponenten in einer Gesamtübersicht dar. Zur Bewertung des Einflusses der analysierten Kraftstoffe werden lediglich die Splash Blend Mischungen herangezogen und deren Eigenschaften auf den

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Basiskraftstoff KK03 referenziert. Ein (+) beschreibt in diesem Zusammenhang eine positive Auswirkung der Komponente, wogegen ein (-) einer erhöhten Vorentflammungsreaktivität zuzuordnen ist.

Tabelle 17: Übersicht der Gasphasenzündungscharakteristik aller untersuchten Kraftstoffkomponenten. Bewertung auf Basis der 20 % mol. Splash Blends.

Stoffgruppe	Komponente	Einzylinder-Motor	Dreizylinder-Motor
Paraffin	Isohexan	--	--
	Isooktan	+	+
Naphthen	Cyclohexan	-	-
Olefin	n-Hexen	--	--
Aromat	Toluol	+	++
Oxygenat	Ethanol	++	++
	Methanol	+	++
Referenz KK03		++/-- Δp_{krit} ≥ 200 mbar +/- Δp_{krit} ≥ 100 mbar	++/-- ΔT_{krit} ≥ 10 K +/- ΔT_{krit} ≥ 5 K

Abseits der Ergebnisse auf Basis der Splash Blends ist das Paraffin n-Heptan im Allgemeinen als äußerst reaktiv einzuordnen. Dies lässt sich aus dem Vorentflammungsverhalten der Match Blends ableiten.

Zusammenfassung der Gasphasenvorentflammungsbewertung:

- Die Stoffgruppenanalyse gibt keinen hinreichenden Ansatz zur Einteilung der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes.
- Anhand der Klopffestigkeit ist ebenfalls keine Charakterisierung möglich.
- Nieder- bzw. Intermediärtemperaturoxidationspfade scheinen maßgebend für die Vorentflammungsneigung zu sein.
- Die Alkohole Ethanol und Methanol bzw. der Aromat Toluol zeigen eine deutliche Verbesserung der Vorentflammungsresistenz.
- Der Einfluss der unterschiedlichen Messmethoden (Druck- bzw. Temperaturvariation) ist von geringerer Bedeutung. Die analysierten Kraftstoffe lassen auf beiden Aggregaten (Einzylinder-Forschungsmotor und Dreizylinder-Serienmotor) ähnliche Selbstzündungstendenzen erkennen.

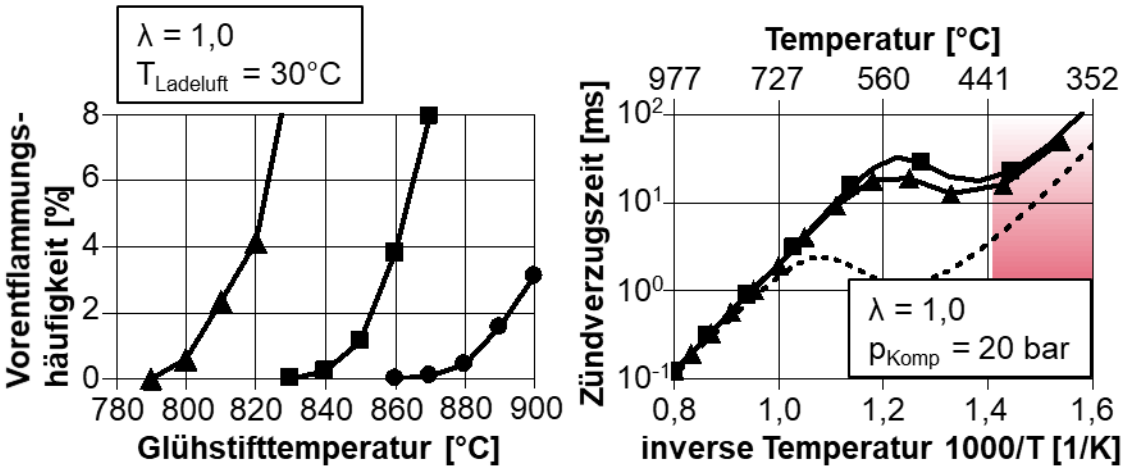
Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

5.3.2 Glühzündung

Da der Dreizylinder-Serienmotor keine Glühstiftadaption erfuhr, wurde die Validierung der HSPI bzw. die Analyse des Glühzündungsverhaltens ausschließlich am Einzylinder-Forschungsmotor der RWTH Aachen University vorgenommen [7]. Eindimensionale Ladungswechselsimulationen der RWTH Aachen University dienen als Hilfsmittel der Beurteilung der mittleren Gastemperatur im Zylinder. Diese erlaubt in Kombination mit der gemessenen kritischen Glühstifttemperatur eine Eingrenzung der wirksamen Reaktionspfade der an heißen Oberflächen induzierten Selbstzündung. Details zur numerischen Simulation sind Kapitel 3.3 in [7] zu entnehmen.

In Abbildung 5-10 ist die Analyse der Grundkraftstoffe KK02 (PRF95) und KK03 (EN 228 E0) zu sehen. Da eine Vielzahl der untersuchten Kraftstoffe aufgrund des „ROZ-Matchens“ einen hohen Anteil an Isooktan bzw. n-Heptan aufweisen, wird auf den Einfluss dieser Komponenten detailliert eingegangen. Hierzu sind im rechten Diagramm der Abbildung die Zündverzugszeitverläufe der beiden Reinstoffe sowie jener eines PRF95-Gemisches aufgetragen. Da die Messungen an der RCM den für Glühzündungen relevanten Temperaturbereich um etwa 1000 K nicht sinnvoll abbilden, werden numerisch ermittelte Zündverzugszeiten für die Bewertung herangezogen. Im Diagramm der Zündverzugszeiten ist der Temperaturbereich der mittleren Gemischtemperatur im Zylinder zusätzlich gekennzeichnet (rot unterlegt). Das linke Diagramm beschreibt die gemessene Glühzündungshäufigkeit mit ansteigender Glühstifttemperatur. Als Bewertungsgrundlage der Kraftstoffe dient jene kritische Glühstifttemperatur, welche zu einer Glühzündungshäufigkeit von 2 % führt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan [% mol.] ([% vol.])	Isooktan [% mol.] ([% vol.])	ROZ
▲	02	PRF95	5,6 (5,0)	94,4 (95,0)	95,0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95,1
■		100 % Isooktan	0	100	100
-------		100 % n-Heptan	100	0	0

Abbildung 5-10: Analyse der Glühzündungscharakteristik der Kraftstoffe: KK02 (PRF95), KK03 (EN 228 E0) und dem Reinstoff Isooktan [7]. Diagramm rechts: berechnete Zündverzugskurven auf Basis des Reaktionsmechanismus nach [120]. Bereich mittlerer Gemischtemperatur im Zylinder ist im Diagramm rechts rot unterlegt.

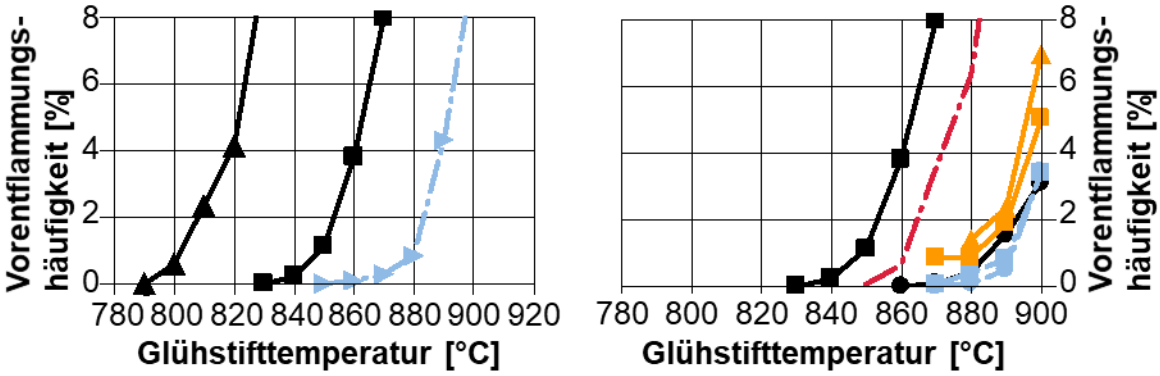
Anhand Abbildung 5-10 sind folgende grundlegende Erkenntnisse abzuleiten:

- Trotz vergleichbarer ROZ von KK02 und KK03 ist bei dem EN 228 E0 Grundkraftstoff (KK03) eine deutlich höhere kritische Glühstifttemperatur zu erkennen. Die lässt auf eine reduzierte Reaktivität von KK03 gegenüber KK02 schließen.
- Die Zugabe von lediglich 5 % vol. n-Heptan zu Isooktan resultiert in einem signifikant reaktiveren Verhalten. So ist die kritische Glühstifttemperatur vom PRF95 um etwa 40 °C geringer als bei dem Reinstoff Isooktan.
- Die deutlich höhere Reaktivität des n-Heptans ist bei der Zündverzugszeitenanalyse lediglich im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich der Oxidation nachzuvollziehen. Es ist demnach davon auszugehen, dass im Fall der Glühzündung nicht ausschließlich der Hochtemperaturbereich maßgebend ist.

In Abbildung 5-11 wird exemplarisch das Glühzündungspotenzial der Ethanol-Kraftstoffe am Einzylinder-Forschungsmotor vorgestellt. Die Darstellung umfasst neben den 20 %

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

mol. bzw. 40 % mol. Ethanol Match Blends und Splash Blends ein 3-Komponenten CFD Surrogat. Zusätzlich ist das Ergebnis der Untersuchung von reinem Ethanol zu sehen.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan [% mol.] ([% vol.])	Isooktan [% mol.] ([% vol.])	ROZ
	02	PRF95	5,6 (5,0)	94,4 (95,0)	95,0
	03	Grundkraftstoff	-	-	95,1
		100 % Isooktan	0	100	100
	12	20 % Ethanol CFD	9,9 (10,2)	70,7 (81,9)	95,6
	15	20 % Ethanol MB	3,4 (4,4)	-	95,2
	18	40 % Ethanol MB	7,3 (10,5)	-	95,6
	29	20 % Ethanol SB	-	-	98,0
	31	40 % Ethanol SB	-	-	100,4
		100 % Ethanol	-	-	106,0

Abbildung 5-11: Glühzündungspotenzial der Ethanol-Kraftstoffe gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor [7].

Vergleicht man das Ergebnis von reinem Ethanol mit dem Resultat des EN 228 konformen E0 Grundkraftstoffes KK03, so ist beim Alkohol eine deutlich geringere kritische Glühstifttemperatur vorherrschend. Abweichend zu den Erkenntnissen der Gasphasenzündung führt Ethanol somit tendenziell zu keiner Verbesserung des Glühzündungspotenzials und bestätigt den Trend, welcher bereits am DE-CFR-Motor beobachtet wurde (Abbildung 5-6).

Auch im Fall der Glühzündung ist die ROZ kein zielführender prädiktiver Kraftstoffparameter. Die kritische Glühstifttemperatur von Ethanol liegt trotz höherer Klopffestigkeit zwischen jener von Isooktan und KK03. KK03 zeigt in diesem Zusammenhang das unkritischste Verhalten.

Die selbstzündungswillige Charakteristik von n-Heptan bewirkt bei Zumischung zu reinem Isooktan eine signifikante Reduktion der kritischen Glühstifttemperatur. Ein Anteil von 5 % vol. n-Heptan verursacht eine Absenkung von mehr als 40 °C; siehe KK02 gegenüber reinem Isooktan in Abbildung 5-10, linkes Diagramm. Interessant ist, dass die Match

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Blends KK15 und KK18, trotz des reaktiven n-Heptans, bei gleichem molarem Ethanol-Anteil ein ähnliches bzw. geringfügig resistenteres Glühzündungsverhalten als die Splash Blends KK29 und KK31 haben. Das n-Heptan resultiert dementsprechend in der Realkraftstoffmischung in einer deutlichen Reduktion der ROZ, jedoch im Unterschied zum PRF95 ebenso in einer Reduktion der Glühzündungsreaktivität.

Hinsichtlich des CFD Surrogates KK12 wirkt sich die Zugabe von Ethanol äußerst positiv auf die Kraftstoffbasis (KK02) aus. Durch das Ethanol wird die kritische Glühstifttemperatur bei KK12 um mehr als 70 °C gegenüber des Basiskraftstoffes angehoben, erreicht jedoch nicht das Niveau der äquivalenten Realgemische.

Das Ergebnis der Ethanol-Analyse zeigt, dass Kraftstoffkomponenten in Abhängigkeit der übrigen in Mischung befindlichen Komponenten zu unterschiedlichen Selbstzündungscharakteristika führen können. Die Bewertung des komponentenspezifischen Zündverhaltens und ein darauf basierender Rückschluss auf das Glühzündungsverhalten der Mischung sind somit nicht zielführend.

Tabelle 18 gibt einen Überblick des Glühzündungsverhaltens aller untersuchten Kraftstoffkomponenten. Die Bewertung beruht auf den Resultaten der 20 % mol. Splash Blends. Bezüglich der detaillierten Analysen des Glühzündverhaltens aller untersuchten Kraftstoffkomponenten wird auf [7] verwiesen.

Tabelle 18: Übersicht der Glühzündungscharakteristik aller untersuchten Kraftstoffkomponenten. Bewertung auf Basis der 20 % mol. Splash Blends.

Stoffgruppe	Komponente	Einzylinder-Motor
Paraffin	Isohexan	--
Naphthen	Cyclohexan	--
Olefin	n-Hexen	--
Aromat	Toluol	o
Oxygenat	Ethanol*	o
	Methanol*	o
Referenz KK03		++/-- $\Delta T_{kritGlüh} \geq 20$ K +/- $\Delta T_{kritGlüh} \geq 10$ K

*negative Charakteristik erst bei höheren Zumischraten

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Zusammenfassung der Glühzündungsbewertung am Einzylinder-Forschungsmotor:

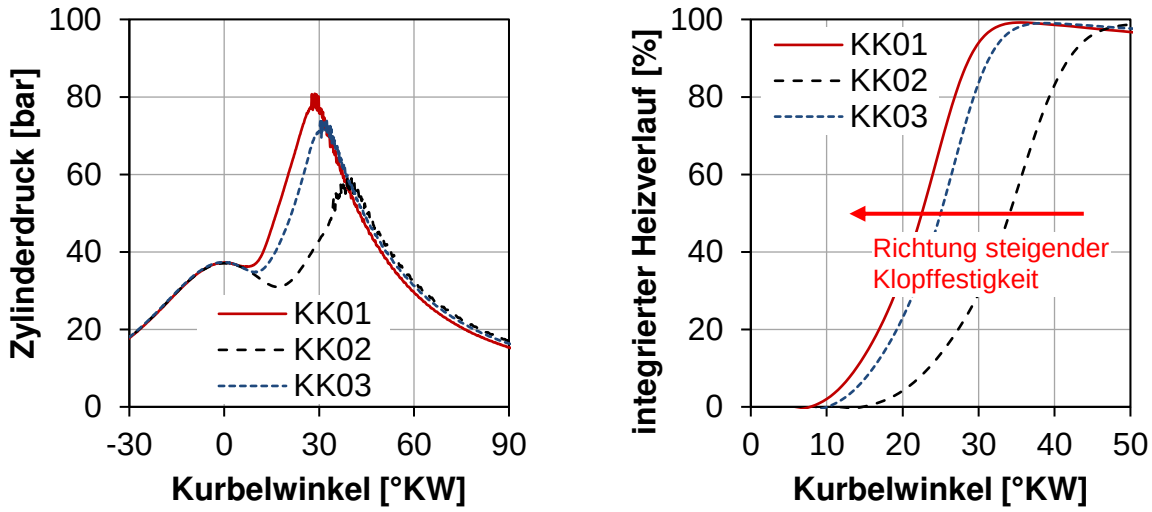
- Zündverzugszeitanalysen lassen darauf schließen, dass nicht ausschließlich die Hochtemperaturoxidationspfade für die Glühzündungsneigung einflussgebend sind.
- Alkohole zeigen ein zur Gasphasenvorentflammungscharakteristik widersprüchliches Glühzündungsverhalten.
- Die Glühzündungsbewertung eines Kraftstoffgemisches auf Basis des Zündverhaltens der Reinkomponenten ist nicht zielführend.
- **Es besteht kein Zusammenhang zur Klopffestigkeit der Kraftstoffe.**

5.3.3 Konventionelles Klopfen

Neben der Vorentflammung bzw. Glühzündung stellt ebenfalls die klopfende Verbrennung ein wesentliches, den ottomotorischen Verbrennungsprozess wirkungsgradlimitierendes, abnormales Verbrennungsphänomen dar. Wie bereits in Kapitel 2.4 erläutert besitzt in diesem Zusammenhang weder die ROZ noch die MOZ das Potenzial unter modernen Motorbetriebsbedingungen eine kraftstoffspezifische Klopfcharakterisierung vorzunehmen.

Nachfolgend wird das Klopfverhalten der Basiskraftstoffe KK02 (PRF95) bzw. KK03 (EN 228 E0) gegenüber dem EN 228 E5 Referenzkraftstoff KK01 am Dreizylinder-Serienaggregat analysiert. Zu diesem Zweck ist im linken Diagramm der Abbildung 5-12 jeweils ein klopfbegrenzter Zylinderdruckverlauf der eben genannten Kraftstoffe dargestellt. Die zugehörigen integrierten Heizverläufe sind dem Diagramm rechts zu entnehmen. Die Ergebnisse basieren auf dem Betriebspunkt 2 (BP2); siehe Tabelle 11 auf Seite 58.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.



KK	Kraftstoff	Paraffin [% vol.]	Naphthen [% vol.]	Aromat [% vol.]	Olefin [% vol.]	Oxygenat [% vol.]	ROZ	MOZ	S
01	EN 228 E5	44,8	5,7	33,9	6,4	9,2	97,3	86,1	11,2
02	PRF95	100,0	-	-	-	-	95,0	95,0	0,0
03	EN 228 E0	52,8	6,0	31,0	6,4	3,9	95,1	85,3	9,8

Abbildung 5-12: Klopfanalyse der Kraftstoffe KK01 (EN 228 E5), KK02 (PRF95) und KK03 (EN 228 E0). Bewertung mittels Dreizylinder-Serienaggregat. Analysierter Betriebspunkt: BP2 (1500 U/min, 1,8 bar abs., 35 °C).

Gemäß der Verbrennungslage (integrierter Heizverlauf) zeigt der EN 228 konforme E5 Benzin (KK01) im realen Motorbetrieb das klopfresistenteste Verhalten (früheste mögliche Verbrennungslage). Dies ist wenig überraschend, da bereits dessen ROZ mit 97,3 signifikant über jener der beiden Vergleichsproben liegt. Interessant ist, dass speziell der PRF95 (KK02), bestehend aus lediglich zwei Komponenten, trotz annähernd identer ROZ zu KK03, eine deutlich schlechtere Performance erkennen lässt. Diese ist anhand der späten klopfbegrenzten Verbrennungslage ableitbar, welche in einem geringeren Zylinderspitzendruck resultiert und letztendlich zu einem wirkungsgradungünstigeren Kraftstoffumsatz führt.

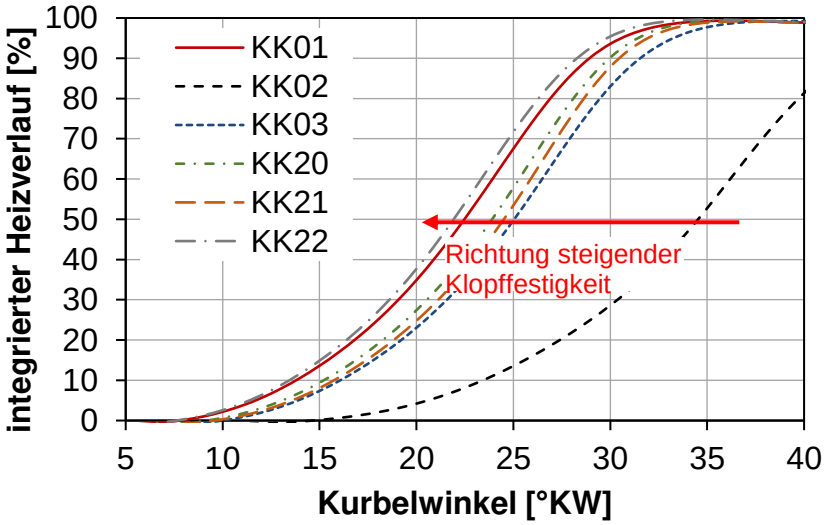
Definitionsgemäß hat der PRF95 eine Sensitivität von Null, wogegen der klopffestere KK03 eine Sensitivität von 9,8 besitzt. Dies bestätigt das in Kapitel 2.4 beschriebene Phänomen, dass unter gewissen Betriebsbedingungen Kraftstoffe gleicher ROZ aber erhöhter Sensitivität ein günstigeres Klopfverhalten aufweisen.

Hinsichtlich der EN 228 Realkraftstoffe (KK01, KK03) ist ein deutlicher Unterschied in der ermittelten Klopffestigkeit (ROZ, MOZ) zu sehen. Sowohl ROZ als auch Sensitivität ist bei KK01 höher. Diese Eigenschaften führen unter den gegebenen Betriebsbedingungen

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

zu einem wirkungsgradoptimaleren Motorbetrieb. Ein wesentlicher Unterschied der beiden Kraftstoffe ist im Oxygenaten-Anteil zu finden, welcher bekanntlich als „Oktan-Booster“ fungiert. Des Weiteren ist bei KK01 ein 5 % vol. Ethanol-Anteil vorhanden, welcher aufgrund des fehlenden NTK-Verhaltens von Ethanol [67] in einer erhöhten Sensitivität resultiert.

In Abbildung 5-13 ist die klopfbegrenzte Verbrennungslage (integrierter Heizverlauf) von fünf untersuchten EN 228 Kraftstoffen (KK01, KK03, KK20, KK21, KK22) zu sehen. Die Darstellung ist um das Ergebnis des CFD Kraftstoffes KK02 (PRF95) erweitert, um dessen abweichendes Klopfverhalten trotz vergleichbarer ROZ zu unterstreichen. Erneut ist hervorzuheben, dass der 2-Komponenten Kraftstoff trotz höchster MOZ die geringste Klopffestigkeit im Vollmotor beobachten lässt.



KK	Kraftstoff	Paraffin [% vol.]	Naphthen [% vol.]	Aromat [% vol.]	Olefin [% vol.]	Oxygenat [% vol.]	ROZ	MOZ	S
01	EN 228 E5	44,8	5,7	33,9	6,4	9,2	97,3	86,1	11,2
02	PRF95	100,0	-	-	-	-	95,0	95,0	0,0
03	EN 228 E0	52,8	6,0	31,0	6,4	3,9	95,1	85,3	9,8
20	EN 228 E5	41,6	5,2	35,1	9,2	8,9	95,4	84,0	11,4
21	EN 228 E5	50,1	3,9	20,7	17,6	7,6	95,3	85,0	10,3
22	EN 228 E10	45,5	3,7	34,0	7,6	9,3	97,0	85,9	11,1

Abbildung 5-13: Verbrennungsanalyse der EN 228 Kraftstoffe KK01, KK03, KK20, KK21 und KK22 sowie des PRF95 KK02 im klopfbegrenzten Betrieb des Dreizylinder-Serienmotors. Die Analyse basiert auf Betriebspunkt BP2 (1500 U/min, 1,8 bar abs., 35 °C).

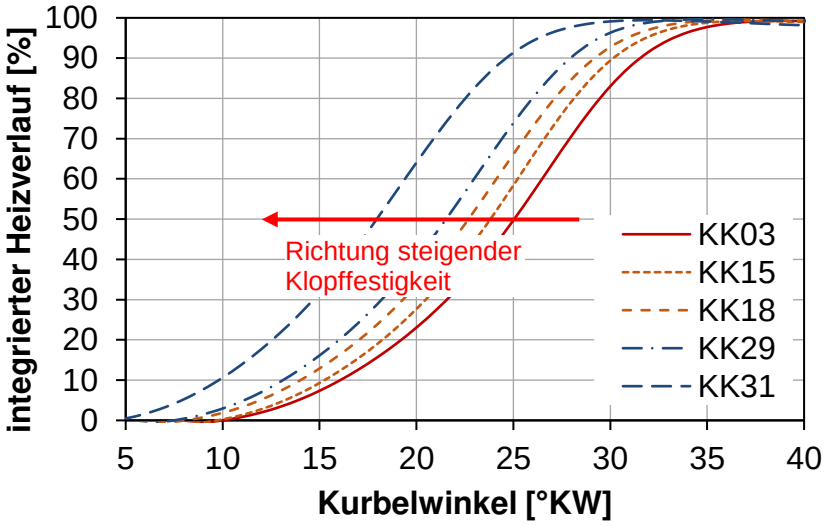
Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Im Unterschied zur VE-Bewertung scheint es zunächst mit Ausnahme von KK02 durchaus einen Zusammenhang der ROZ zur motorischen Kraftstoffperformance zu geben. So resultiert die hohe ROZ der Kraftstoffe KK01 und KK22 (ROZ97) in einer gegenüber den restlichen vier Kraftstoffen deutlich früheren Verbrennungslage im Vollmotor.

Ein simpler Berechnungsansatz zur Ermittlung der Klopffestigkeit auf Basis der Grundkraftstoffzusammensetzung ist nicht ableitbar. Dies zeigt sich daran, dass die beiden EN 228 E5 Benzine KK01 und KK20 trotz vergleichbarer Ethanol- bzw. Oxygenaten-Anteile deutlich unterschiedliche Klopffestigkeiten aufweisen. So hat KK01 eine um etwa 2 Oktanzahlen höhere ROZ als KK20, obwohl dieser einen höheren Aromaten-Gehalt beinhaltet, welcher im Allgemeinen zu einer klopffesteren Eigenschaft führt. Grundsätzlich ist zu berücksichtigen, dass die Selbstzündungsreaktivität der unterschiedlichen Isomere eines Kohlenwasserstoffes bereits signifikant verschieden sein kann [71].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

In Abbildung 5-14 wird anhand der Splash Blend Mischungen (SB) der Einfluss des Ethanols auf das Klopfverhalten ersichtlich.



KK	Kraftstoff	n-Heptan		ROZ	MOZ	S
		[% mol.]	[% vol.]			
03	Grundkraftstoff	-	-	95,1	85,3	9,8
15	20 % Ethanol MB	3,4	4,4	95,2	84,3	10,9
18	40 % Ethanol MB	7,3	10,5	95,6	84,4	11,2
29	20 % Ethanol SB	-	-	98,0	86,4	11,6
31	20 % Ethanol SB	-	-	100,4	87,5	12,9

Abbildung 5-14: Verbrennungsanalyse der Ethanol-Kraftstoffe im klopfbegrenzten Betrieb unter Betriebspunkt 2 (1500 U/min, 1,8 bar abs., 35 °C) des Dreizylinder-Serienaggregates.

Sowohl bei der ROZ als auch im motorischen Betrieb zeigen die Splash Blend Kraftstoffe KK29 und KK31 durch Zumischung von Ethanol ein signifikant klopffesteres Verhalten. Dieser Effekt ist nicht sonderlich überraschend und bereits hinreichend bekannt. Vielmehr sind die Match Blend Kraftstoffe (MB) KK15 und KK18 von Interesse. Durch die gesteigerte ROZ der Splash Blends wird mithilfe von n-Heptan die Klopffestigkeit der Match Blends auf eine ROZ von 95 reduziert. Trotz angepasster ROZ ist bei KK15 und KK18 jedoch weiterhin ein wirkungsgradgünstigerer Betrieb als bei dem Kraftstoff KK03 möglich. Auf Basis der ROZ95 Ethanol Match Blends wird somit der in [1], [6] erwähnte Effekt einer unzureichenden ROZ Bewertung alkoholhaltiger Kraftstoffe bestätigt.

Mittels der eben gezeigten Auswertemethodik wurde die gesamte Kraftstoffauswahl analysiert und anschließend der Komponenteneinfluss auf Basis der Splash Blends

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

bewertet. Die Bewertungsmatrix in Tabelle 19 zeigt das Resultat dieser Bewertung und berücksichtigt die klopfbegrenzten MFB50% aller untersuchten Betriebspunkte.

Tabelle 19: Bewertungsmatrix der komponentenspezifischen Klopfcharakteristik auf Grundlage der Spalsh Blend Kraftstoffe. Referenz der Bewertung ist der Basiskraftstoff KK03. Ein Plus (+) kennzeichnet eine gegenüber KK03 reduzierte Reaktivität.

	Komponente	BP1	BP2	BP3	BP4	BP5	BP6	BP7
Paraffin	Isohexan	--	-	-	--	-	-	--
	Isooktan	o	o	o	o	o	o	+
Naphthen	Cyclohexan	o	o	o	-	o	o	--
Olefin	n-Hexen	--	-	-	--	-	-	--
Aromat	Toluol	++	++	++	+	++	++	++
Oxygenat	Ethanol	++	++	++	++	++	++	++
	Methanol	+	++	++	++	++	++	+
Referenz KK03		++/-- ΔMBF50% ≥ 3 °KW +/- ΔMBF50% ≥ 1 °KW						

Die Bewertungsmatrix lässt erkennen, dass die Alkohole Ethanol und Methanol bzw. der Aromat Toluol als Beimischkomponente in allen Betriebspunkten zu einer reduzierten Reaktivität führen. Grundsätzlich ist das Potenzial der jeweiligen Komponenten jedoch vom Betriebspunkt abhängig. So zeigt zum Beispiel Isooktan lediglich in Betriebspunkt BP7 (Ansaugluftemperatur 120 °C) einen Benefit im Vollmotorbetrieb.

Im Zuge dieser Arbeit wurden sieben unterschiedliche Betriebspunkte gewählt (Tabelle 11), um gezielt den Einfluss einzelner Motorparameter auf die Klopfcharakteristik zu analysieren. Tabelle 20 gibt einen Überblick der Auswirkung eines geänderten Motorbetriebsparameters auf das komponentenspezifische Klopfverhalten.

Tabelle 20: Einfluss einzelner Motorparameter auf die komponentenspezifische Klopfcharakteristik. Ein Plus (+) kennzeichnet eine reduzierte Reaktivität.

	Komponente	erhöhte Drehzahl	erhöhter Ladedruck	erhöhrte Ladelufttemp.	"fettes" Lambda
Paraffin	Isohexan	-	+	-	+
	Isooktan	-	o	+	o
Naphthen	Cyclohexan	-	o	-	o
Olefin	n-Hexen	-	+	-	+
Aromat	Toluol	-	o	-	+
Oxygenat	Ethanol	o	o	-	+
	Methanol	o	+	-	+
Referenz KK03		+/- gibt nur Tendenz an, keine Wertung!			

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Eine wesentliche Erkenntnis dieser Analyse ist die Temperaturabhängigkeit des Isooktans. Dieses Verhalten ist durchaus nachvollziehbar und deckt sich mit den Erkenntnissen aus der Literatur [5], [27], [114], wonach Isooktan eine mit zunehmender Temperatur selbstzündungsresistentere Charakteristik zeigt. So hat Isooktan definitionsgemäß eine MOZ von 100 und die MOZ-Gemischtemperatur vor Einlass weist mit 149 °C ein ähnlich kritisches Niveau auf, wie BP7 im Vollmotor (120 °C Ladelufttemperatur).

Zusammenfassung der Klopfbewertung am Dreizylinder-Serienaggregat:

- Auf Basis der Daten von Betriebspunkt 2 resultiert der PRF95 im klopfbegrenzten Betrieb in einer wirkungsgradungünstigeren Schwerpunktlage als die Realkraftstoffe ähnlicher ROZ.
- Eine hohe Sensitivität (geringe MOZ) ist nicht unmittelbar mit einer schlechteren Kraftstoffperformance verbunden.
- Isooktan lässt eine signifikante Temperaturabhängigkeit des Klopfverhaltens erkennen. Mit steigender Temperatur ist eine Reduktion der Selbstzündungsneigung verbunden, wodurch Isooktan ein klopffesteres Ergebnis liefert. Diese Beobachtung deckt sich mit den Erkenntnissen aus der Literatur (siehe Kapitel 2.4), wonach Paraffine infolge des ausgeprägten NTK-Verhaltens unter heißen Betriebsbedingungen ein gegenüber Kohlenwasserstoff-Gemischen klopfresistenteres Verhalten zeigen als unter kalten Bedingungen.
- Die Alkohole Ethanol und Methanol, sowie das Aromat Toluol führen analog der Gasphasenvorentflammungscharakteristik, in allen Betriebspunkten zu einer signifikant besseren Kraftstoffperformance.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

6 Validierung und Optimierung der entwickelten Prüfverfahren

Die zuvor dargestellten Analysen zeigen auf, dass die thermodynamischen Randbedingungen im Zylinder einen signifikanten Einfluss auf die kraftstoffspezifische Selbstzündungsneigung haben. Inwiefern nun CFR-Prüfverfahren zur Charakterisierung des Zünd- bzw. Verbrennungsverhaltens eines Kraftstoffes in modernen Motoren geeignet sind, lässt sich anhand einer **statistischen Regressionsanalyse** am anschaulichsten beurteilen. Bevor die Ergebnisse dieser Analysen aufgezeigt werden, wird zunächst kurz auf die zugrundeliegende Theorie des statistischen Werkzeuges eingegangen.

Statistische Regressionsanalyse

Einen Spezialfall der statistischen Regressionsanalyse beschreibt die einfache lineare Regression. Bei dieser wird nach Gleichung 6-1 lediglich eine unabhängige Variable X zur Erklärung der abhängigen Variablen Y für n Wertepaare $(x_1, y_1),\ldots, (x_n, y_n)$ genützt. U_i beschreibt darin einen stochastischen Fehlerterm, welcher die Abweichung der Wertepaare vom idealen Zusammenhang (Geraden) widerspiegelt.

$$Y_i=\beta_0+\beta_1*x_i+U_i \qquad \textbf{Gleichung 6-1}$$

Y_i…Zielgröße (abhängige Variable)
x_i…Einflussgröße (unabhängige Variable)
β_0, β_1…unbekannte skalare Parameter
U_i…Störgröße (Fehler)

Unter Zuhilfenahme der Kleinste-Quadrate-Schätzung werden die unbekannten Regressionsparameter β_0, β_1 geschätzt und dabei die Abweichung der geschätzten Regressionswerte $\hat{y}_i$ (Gleichung 6-2) und der beobachteten Werte y_i, die sogenannten Residuen, minimiert. Im Zuge des eben beschriebenen Vorgehens werden die Formeln des Niveauparameters b_0 und des Steigungsparameters b_1 (Gleichung 6-3 bzw. Gleichung 6-4) zur Bildung der Regressionsgeraden bestimmt.
Ziel der Analysemethodik ist die Darstellung einer Geraden, welche möglichst genau ein Streudiagramm von Daten wiedergibt. Das Bestimmtheitsmaß R^2 (Gleichung 6-5) misst

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

anschließend die Anpassungsgüte des Regressionsmodelles und liegt zwischen 0 % und 100 % (perfekter Zusammenhang) [121].

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 * x_1 \qquad \textbf{Gleichung 6-2}$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 * \bar{x} \qquad \textbf{Gleichung 6-3}$$

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) * (y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \qquad \textbf{Gleichung 6-4}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2} \qquad \textbf{Gleichung 6-5}$$

x_i, y_i…Messwerte
$\bar{x}$, $\bar{y}$…Mittel der Messwerte
b_0… Niveauparameter (Schätzwert für β_0)
b_1…Steigungsparameter (Schätzwert für β_1)
$\hat{y}_i$…geschätzte Regressionswerte
R^2…Bestimmtheitsmaß

In den nachfolgenden Diagrammen werden als x-Werte unter anderem die Kraftstoffkennzahlen ROZ, MOZ, Sensitivität DOZ, CPI und HSPI herangezogen sowie physikalische und chemische Kraftstoffparameter. Die am modernen Aggregat ermittelte Selbstzündungsneigung (kritische Glühstifttemperatur, kritischer Ladedruck, kritische Ladelufttemperatur) wird als abhängige Variable y definiert. Das sich daraus ergebende Bestimmtheitsmaß R^2 beschreibt anschließend die Korrelationsgüte des linearen Zusammenhanges und demnach das Potenzial der Kennzahlen bzw. die Relevanz kraftstoffspezifischer Eigenschaften. In der vorliegenden Arbeit wird ein Bestimmtheitsmaß größer 90 % angestrebt.

6.1.1 Gasphasenvorentflammung - CPI

Die Untersuchung einer Vielzahl an physikalischer und chemischer Eigenschaften der Kraftstoffe hat keinen nennenswerten Zusammenhang zur kraftstoffspezifischen Vorentflammungsreaktivität erkennen lassen. Abbildung 6-1 stellt dies exemplarisch anhand eines Auszuges ermittelter Bestimmtheitsmaße R^2 dar. Hierbei wurde versucht, einen Zusammenhang der Stoffzusammensetzung (Gehalt an Paraffinen, Naphthenen, etc.) zur Vorentflammungsneigung am Vollmotor bzw. Einzylinder-Forschungsmotor nachzuweisen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

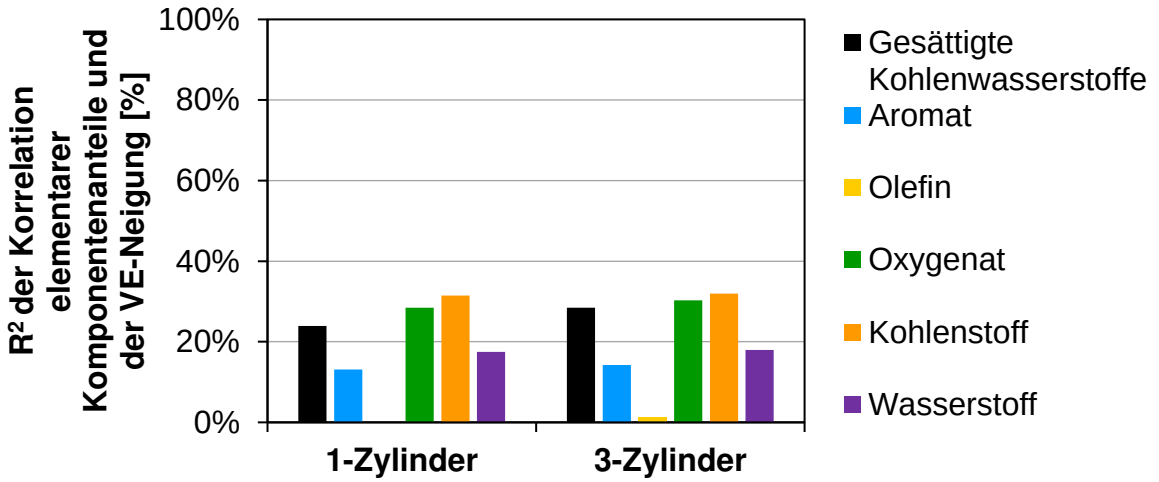


Abbildung 6-1: Qualität (R^2) der Übertragbarkeit (Korrelationsanalyse**) elementarer Kraftstoffkomponentenanteile** auf die kraftstoffspezifische Vorentflammungsneigung infolge einer kritischen Gasphase. CFD Surrogate sowie KK03 und KK31 sind in der Analyse nicht berücksichtigt.

Es zeigt sich, dass das kraftstoffspezifische Selbstzündungsverhalten nicht simpel von den Stoffgruppenanteilen abzuleiten ist. So sind zwar tendenzielle Zusammenhänge erkennbar, jedoch erlauben diese keine belastbare Prognose des Vorentflammungsverhaltens.

Ein ähnliches Resultat ist hinsichtlich der physikalischen Eigenschaften der Kraftstoffe zu beobachten. Gemäß [3] konnte ein Zusammenhang des Kraftstoffverdampfungsverhaltens und der Vorentflammungsreaktivität aufgezeigt werden. Ein simpel auf dem Siedeverhalten der Kraftstoffe basierender Korrelationsansatz zur Bewertung der Reaktivität konnte in dieser Arbeit jedoch nicht nachgewiesen werden. Abbildung 6-2 gibt eine Übersicht der Korrelationsergebnisse relevanter physikalischer Eigenschaften. T40% bzw. T60% entsprechen jenen Temperaturen bei welchen 40 bzw. 60 Prozent des Kraftstoffes verdampft sind.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

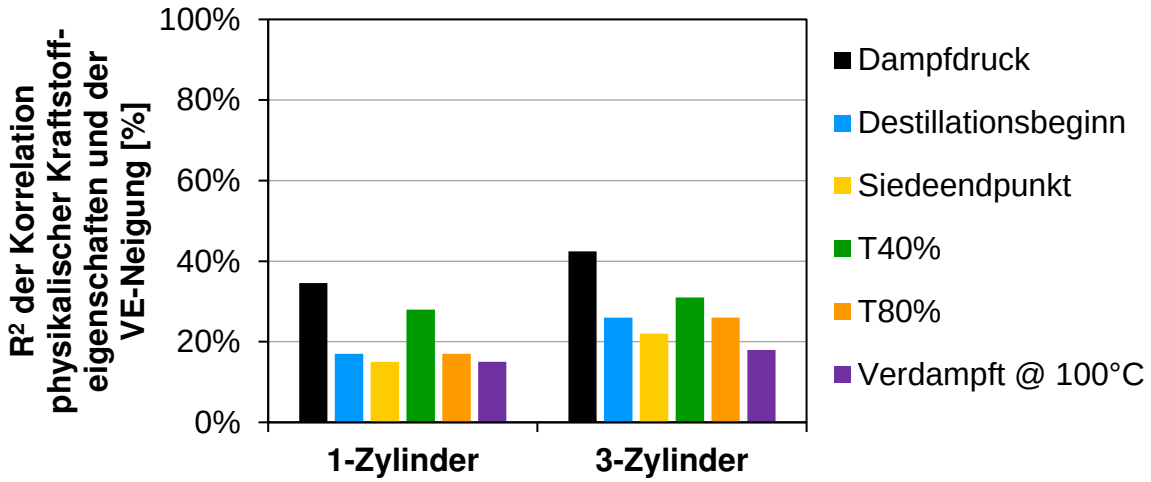


Abbildung 6-2: Resultat der Korrelationsanalyse der Selbstzündungsneigung infolge einer kritischen Gasphase und **physikalischer Kraftstoffeigenschaften**. CFD Surrogate sowie KK03 und KK31 sind in der Analyse nicht berücksichtigt.

Da weder chemische noch physikalische Eigenschaften eine belastbare Vorentflammungsprognose zulassen, ist die Entwicklung einer experimentellen Prüfmethodik zielführend. Um eine auf dem CFR-Motor basierende Kennzahl zu entwickeln, welche die gasphaseninduzierte Vorentflammungsneigung der Kraftstoffe korrekt einordnet, ist es zunächst von Interesse ob die bestehenden Kennzahlen (ROZ, MOZ, Sensitivität) grundsätzlich in der Lage sind, das Vorentflammungsverhalten zu beschreiben.

In Abbildung 6-3 ist die Korrelationsanalyse betreffend die Resultate der modernen Versuchsträger (Einzylinder-Forschungsmotor bzw. Dreizylinder-Serienaggregat) und der ROZ dargestellt. Im Fall der Vollmotor-Ergebnisse sind in dieser und nachfolgenden Datenanalysen die CFD Surrogate sowie der 40 % Ethanol Splash Blend (KK31) nicht enthalten. KK31 konnte aufgrund des hohen Ethanol-Anteiles am Vollmotor nicht unter vertretbarem Schadensrisiko zur Vorentflammung gebracht werden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

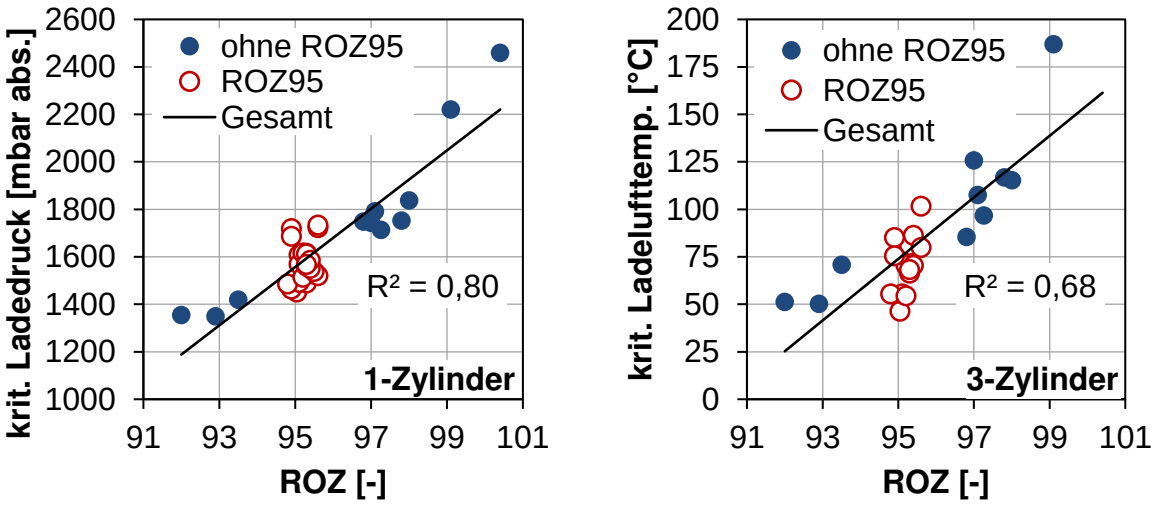


Abbildung 6-3: Korrelationsanalyse des kritischen Ladedruckes am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat und der ROZ. Um die CFD Surrogate und KK31 reduzierte Kraftstoffauswahl beim Dreizylinder-Aggregat.

Anhand der Daten scheint es zunächst durchaus einen Zusammenhang zwischen der ROZ und der Gasphasenzündungsreaktivität in modernen Aggregaten zu geben. Dies relativiert sich jedoch bei detaillierter Betrachtung der Daten. Die Klopffestigkeit kann zwar einen groben Hinweis darauf geben, wie ein Kraftstoff einzuordnen ist, sie lässt jedoch keine allgemeingültige Bewertung zu. So zeigen die ROZ95-Kraftstoffe (rote Kreise) trotz ähnlicher bzw. gleicher Klopffestigkeit ein signifikant unterschiedliches Vorentflammungsverhalten. Dies ist im Detail in Abbildung 6-4 zu sehen. Die darin abgebildeten Kraftstoffe umfassen lediglich jene Proben gleicher bzw. ähnlicher ROZ. Bei der ROZ ist gemäß Norm [100] eine Messtoleranz von +/- 0,3 OZ zu berücksichtigen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

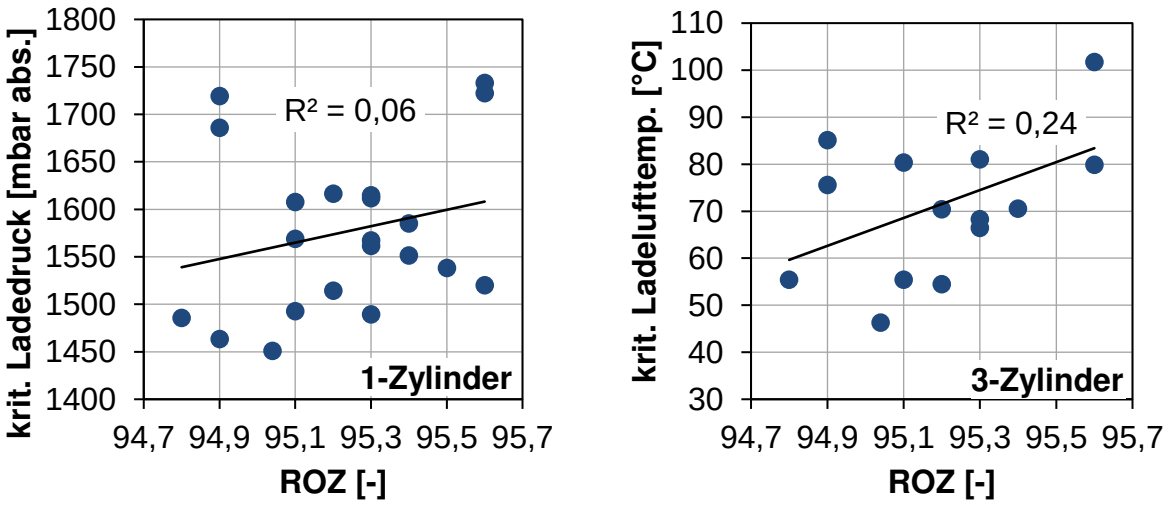


Abbildung 6-4: Korrelationsanalyse des kritischen Ladedruckes am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat und der ROZ. Die Analyse enthält ausschließlich Kraftstoffe gleicher bzw. ähnlicher ROZ. Die 3-Zylinder-Daten enthalten keine CFD Surrogate.

Die Resultate weiterer Korrelationsanalysen relevanter Kennzahlen, unter anderem der bereits in [1], [6] entwickelten Methode CPI, sind Abbildung 6-5 zu entnehmen.

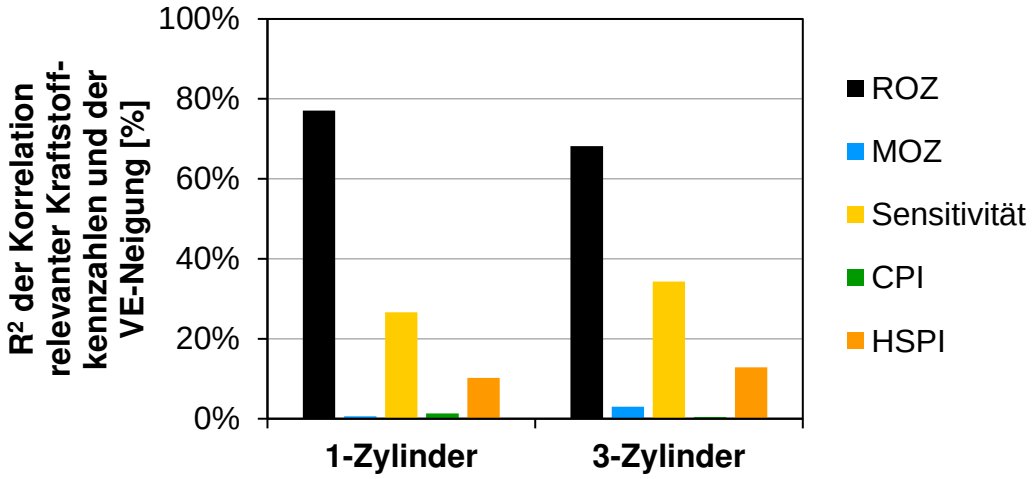


Abbildung 6-5: Bestimmtheitsmaß R^2 der linearen Korrelationen zwischen kritischem Ladedruck gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur gemessen am Dreizylinder-Serienmotor und den relevanten Kraftstoffkennzahlen.

Überraschend ist die Tatsache, dass vor allem die CPI, welche zur Bewertung einer Vorentflammung in [1], [6] entwickelt wurde, am schlechtesten abschneidet. Unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen Zündcharakteristik eines

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Kohlenwasserstoffgemisches ist anzunehmen, dass die thermodynamischen Brennraumbedingungen des CPI-Verfahrens von jenen des modernen Motors signifikant abweichen und somit eine unzureichende Übertragbarkeit vorherrscht.

Um diese Annahme zu bestätigen, ist zunächst eine detaillierte Analyse der CPI Korrelation in Abbildung 6-6 notwendig.

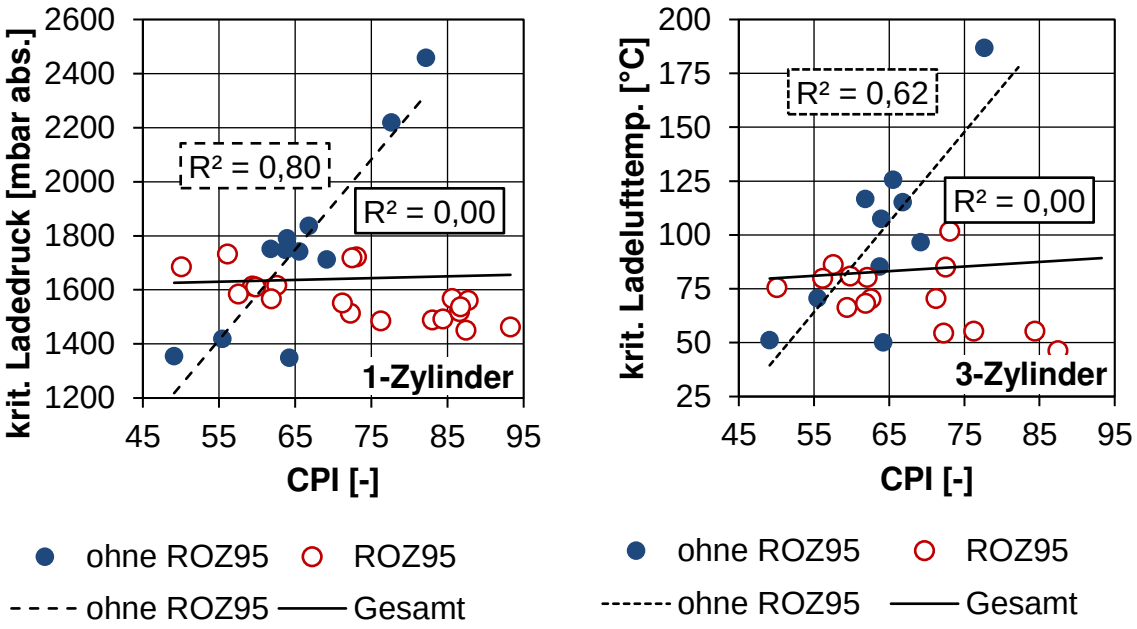


Abbildung 6-6: Korrelationsanalyse des kritischen Ladedruckes am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat und der am modifizierten DE-CFR-Motor ermittelten CPI. Um CFD Surrogate und KK31 reduzierte Kraftstoffauswahl beim Dreizylinder-Aggregat.

Anhand der obigen Korrelationsanalysen ist keine Übereinstimmung der Daten der modernen Versuchsträger und der CPI zu beobachten. Blendet man jedoch jene Kraftstoffe mit einer ROZ von 95 (rote Kreise) aus dieser Analyse aus, so ist ein deutlicher Anstieg der Korrelationsgüte zu verzeichnen.

Der Kraftstoffauswahl in Tabelle 13 ist zu entnehmen, dass der Großteil der ROZ95-Kraftstoffe einen signifikanten Anteil an n-Heptan bzw. Isooktan aufweist. Bereits aus [101] ist bekannt, dass paraffinhaltige Kraftstoffe eine äußerst ausgeprägte NTK-Charakteristik besitzen und in Abhängigkeit der thermodynamischen Randbedingungen zu signifikant unterschiedlichen Selbstzündungstendenzen führen. Da im Fall der CPI-Methodik die Ansauglufttemperatur 200 °C beträgt, ist davon auszugehen, dass die In-Zylinder-Bedingungen am CFR-Aggregat deutlich von jenen moderner Motoren abweichen. Dementsprechend ist es von Interesse die In-Zylinder-Bedingungen der

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Versuchsträger zu untersuchen, um weiterführende Optimierungsmaßnahmen der potenziellen Prüfverfahren durchführen zu können.

Zu diesem Zweck sind in Abbildung 6-7 die In-Zylinder-Temperaturverläufe während des Kompressionshubes für unterschiedliche Aggregate bzw. Prüfmethoden dargestellt. Das Diagramm aus [114] wurde um die Betriebsbedingungen des CPI-Verfahrens bis zum Zeitpunkt der Selbstzündung erweitert. Das Resultat gibt eine qualitative Abschätzung der Brennraumbedingungen wieder. Die CPI-Daten basieren auf der Zylinderdruckauswertung während einer Messung mit dem Reinstoff Isooktan.

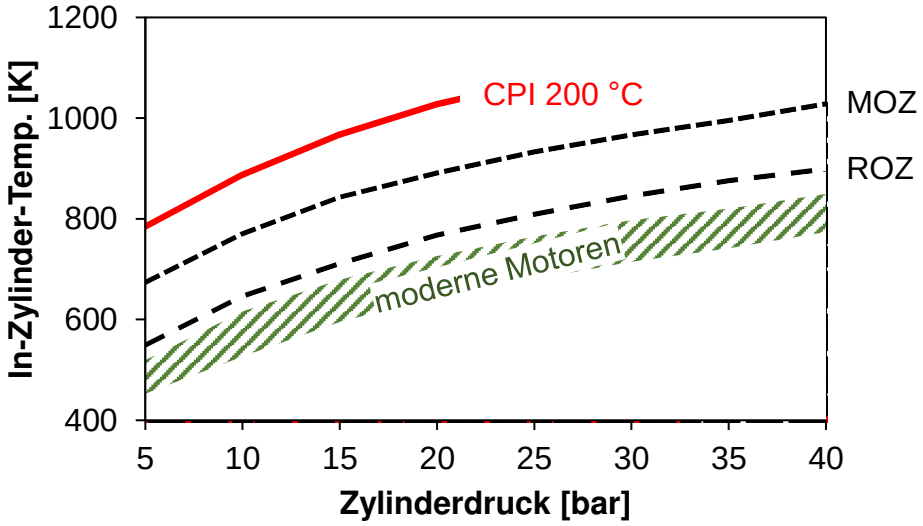


Abbildung 6-7: In-Zylinder-Bedingungen während des Kompressionshubes (erweiterte Darstellung) [114].

Es wird die Annahme bestätigt, dass die thermodynamischen Randbedingungen des CPI-Verfahrens signifikant von jenen moderner Motoren abweichen. Aufgrund von Temperaturen > 1000 K sind bei der CPI-Methodik die Hochtemperaturoxidationspfade maßgebend für die Selbstzündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches. Da in modernen Motoren während des Kompressionshubes deutlich geringere Temperaturen vorherrschen, sind hierbei der Nieder- und Intermediärtemperaturbereich der Oxidation ausschlaggebend. Demensprechend sind die unterschiedlichen Selbstzündungs-tendenzen wenig überraschend.

Auf Basis dieser Erkenntnis wurde eine Modifikation des CPI-Verfahrens bzw. eine Adaption des DE-CFR-Motors vorgenommen. Mittels einer externen Aufladung (Kompressor) inklusive Ladeluftkühlung ist es möglich die CPI-Methodik an moderne

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Betriebsbedingungen anzupassen. Tabelle 21 stellt die Betriebsbedingungen des modifizierten CPI-Verfahrens jenen der Methodik nach [1], [6] gegenüber.

Tabelle 21: Vergleich der modifizierten CPI-Betriebsbedingungen gegenüber jenen nach Martin (2013) [1].

Betriebsbereich	CPI	CPI modifiziert
Gemischbildung	DE	DE
Drehzahl / 1/min	900	900
Zündzeitpunkt (ZZP) / ° KWvZOT	f(MFB50%)	f(MFB50%)
50% Umsatzschwerpunkt (MFB50%) / ° KW nZOT	35	35
Ansauglufttemperatur / °C	200	**30**
Gemischtemperatur / °C	-	-
Ladedruck / mbar abs.	atmosphärisch	**1100**
Abgasverbrennungs-luftverhältnis λ / 1	1	1
Einspritzende / ° KW vZOT	203	203
Kraftstoffraildruck / bar	60	60
Verdichtungsverhältnis ε / 1	variabel	variabel

Unter Berücksichtigung schadensrelevanter Aspekte entschied man sich für eine moderate Aufladung von 1100 mbar absolut. Die Ansauglufttemperatur wurde gleichzeitig von zuvor 200 °C auf 30 °C reduziert. Die Auswirkung der geänderten Betriebsbedingungen auf die In-Zylinder-Bedingungen beider Verfahren sind anhand eines Vergleiches der Temperaturkurven während der Kompression in Abbildung 6-8 dargestellt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

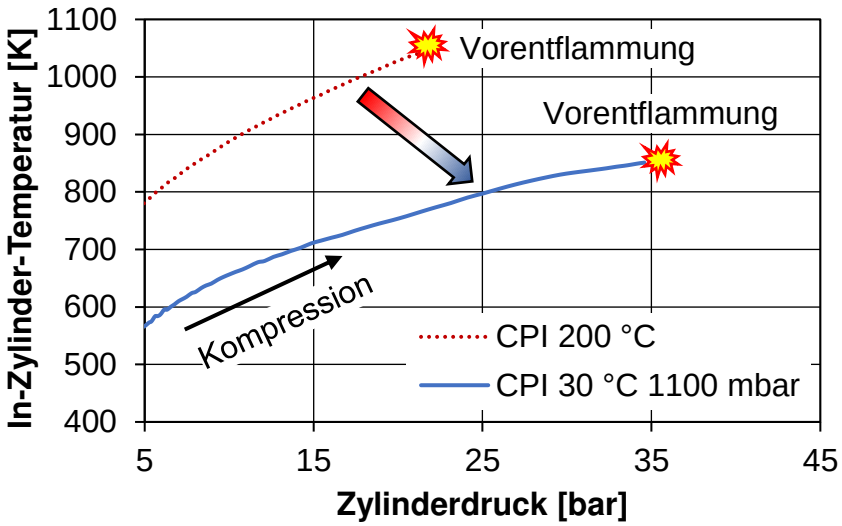


Abbildung 6-8: In-Zylinder-Bedingungen während des Kompressionshubes unter modifizierten CPI-Randbedingungen. Probe: Isooktan.

Es wird deutlich, dass es infolge des modifizierten Ansaugluftzustandes zu signifikanten Änderungen im Druck- und Temperaturverlauf kommt. Durch das reduzierte Temperaturniveau und eines demzufolge unkritischeren thermodynamischen Zustandes ist ein erhöhte Verdichtung (variables Verdichtungsverhältnis) notwendig, um eine Vorentflammung zu initiieren. Im Fall von Isooktan entspricht dies einer Anhebung um etwa 2 Epsilon-Einheiten. Das erhöhte Verdichtungsverhältnis resultiert in einem höheren Kompressionsenddruck. Dieser und das gleichzeitig reduzierte Temperaturniveau führen dazu, dass die Nieder- bzw. Intermediärtemperaturoxidation an Dominanz gewinnen.
Anhand von Simulationen soll dieser Sachverhalt verdeutlicht werden [7].
Abbildung 6-9 zeigt simulierte Zündverzugszeiten des Basismischkraftstoffes KK03 bzw. im Fall der modifizierten CPI des Reinstoffes Isooktan. Der Unterschied des Kraftstoffes ist für die folgende qualitative Bewertung irrelevant.
Die dem Verlauf zugrundeliegenden Zündverzugszeiten wurden anhand der experimentell ermittelten Druck- und Temperaturwerte während der Kompression berechnet. Das heißt, zum Zeitpunkt x der Kompression herrschen der Druck p und die Temperatur T im Brennraum vor. Dieser Zustand wird anschließend zur Berechnung der Zündverzugszeit des Kraftstoffes zum Zeitpunkt x herangezogen. Der betrachtete Kurbelwinkelbereich beschränkt sich auf den Kompressionshub bis zum Zeitpunkt der Selbstzündung.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

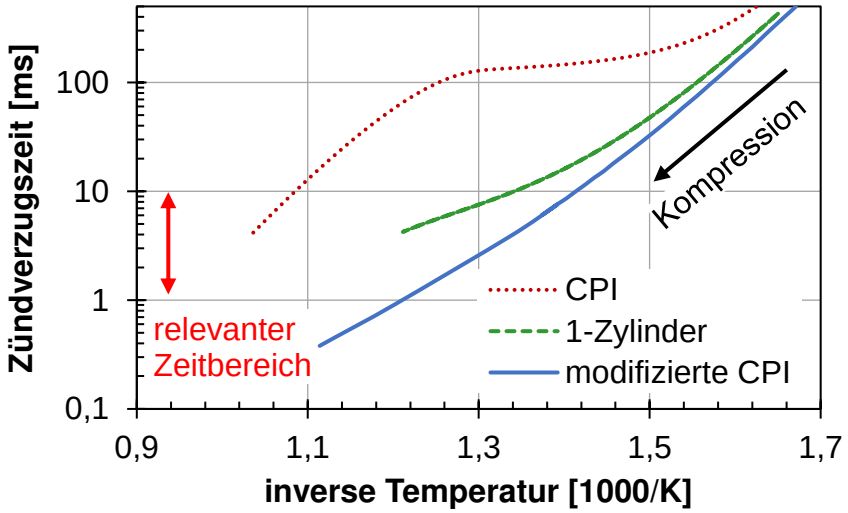


Abbildung 6-9: Simulation der Zündverzugszeiten unter den Betriebsrandbedingungen des CPI bzw. modifizierten CPI Verfahrens und der Gasphasen-vorentflammungsuntersuchung am 1-Zylinder-Forschungsmotor des VKA der RWTH Aachen.

Anhand des Diagrammes ist die infolge der Kompression abnehmende Zündverzugszeit des Luft-Kraftstoff-Gemisches von rechts oben nach links unten zu erkennen. Zu Beginn des Kompressionshubes sind Zündverzugszeiten > 100ms zu beobachten. Bei einer Drehzahl von 900 U/min (CFR-Motor) bzw. 1500 U/min (Einzylinder-Forschungsmotor) entspricht 1 ms einem Kurbelwinkelbereich von 5,4 °KW bzw. 9 °KW. Als relevantes Zeitintervall einer potenziellen Vorentflammung wird somit ein Bereich von 1 ms – 10 ms angesehen.

Das Ergebnis der numerischen Betrachtung in Abbildung 6-9 lässt folgende Schlüsse zu:

- Bei dem CPI-Verfahren nach [1], [6] (200 °C Ansauglufttemperatur) führen erst sehr hohe Temperaturen (> 1,1 inverser Temperatur bzw. 900 K) zu Zündverzugszeiten < 10 ms. Hochtemperaturoxidationsprozesse sind demzufolge dominant.
- Durch Anpassung der CPI-Betriebsparameter kommt es bei deutlich geringeren mittleren Brennraumtemperaturen (< 1,4 inverser Temperatur bzw. 750 K) zum Unterschreiten einer Zündverzugszeit von 10 ms.
- Die **Zündverzugszeit der CPI-Methodik ist unter angepassten Betriebsparametern** vergleichbar mit jener **am Einzylinder-Forschungsmotor**.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

- Nieder- bzw. Zwischentemperaturoxidationspfade sind aufgrund des vorherrschenden Druck- und Temperaturniveaus **maßgebend an den Selbstzündungsphänomenen** im modernen Aggregat sowie dem modifizierten CPI-Verfahren beteiligt.

Folgend wird der Einfluss der angepassten Betriebsparameter auf die Vergleichbarkeit der Vorentflammungstendenzen analysiert. Abbildung 6-10 stellt hierzu die ermittelte CPI (200 °C) dreier ausgewählter Kraftstoffe den Resultaten der modifizierten CPI-Methode (CPI 30 °C, 1100 mbar) gegenüber.

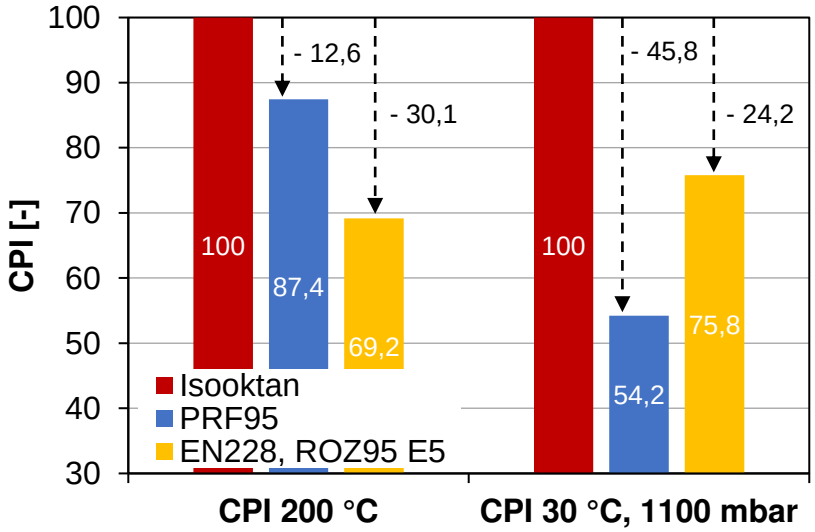


Abbildung 6-10: Auswirkung der modifizierten CPI-Betriebsparameter auf die Vorentflammungsbewertung der Kraftstoffproben PRF95 (KK02) und EN 228 ROZ95 E5 (KK01).

Die geänderten Betriebsparameter resultieren in einem Wechsel der Vorentflammungstendenzen der Kraftstoffe. War zunächst der PRF95 vorentflammungsresistenter als der ROZ95 E5 Tankstellenkraftstoff, so ist gemäß dem modifizierten Verfahren dies nicht mehr der Fall. Beiden gemein ist, dass Isooktan das unkritischste Verhalten aufweist.
Inwieweit sich dieser Sachverhalt auf die Korrelationsanalyse betreffend einer größeren Kraftstoffauswahl auswirkt ist in Abbildung 6-11 zu sehen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

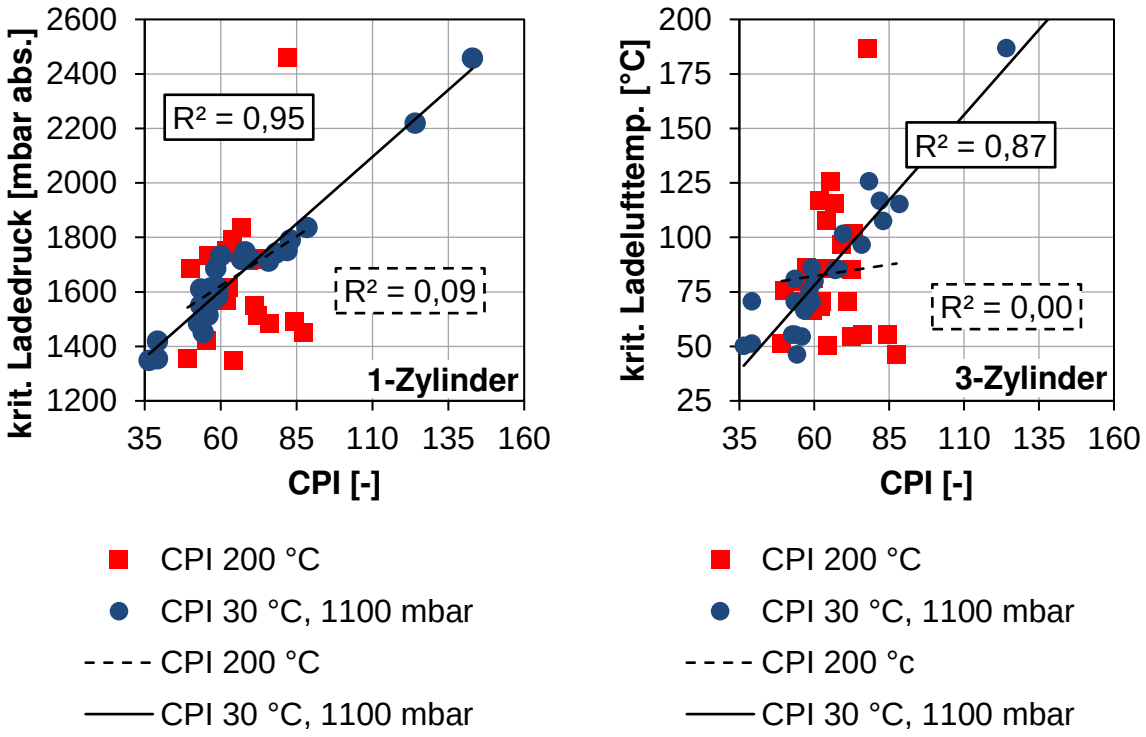


Abbildung 6-11: Korrelationsanalyse der CPI 200 °C im Vergleich zur CPI 30 °C, 1100 mbar (modifizierte CPI) und dem kritischen Ladedruck am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat (ohne 40 % mol. Ethanol Splash Blend (KK31)). CFD Surrogate und KK03 sind in der Auswertung nicht enthalten.

Mit einem Bestimmtheitsmaß von 0,95 bzw. 0,87 lassen die Ergebnisse ein signifikant hohes Potenzial der kraftstoffspezifischen Vorentflammungsbewertung auf Basis der modifizierten CPI Betriebsbedingungen erkennen.

Es wurde bereits aufgezeigt, dass Kraftstoffe gleicher bzw. ähnlicher ROZ deutlich abweichendes Vorentflammungsverhalten aufweisen können (Abbildung 6-4). Um das Potenzial der CPI zu unterstreichen, sind in Abbildung 6-12 (Einzylinder-Forschungsmotor) bzw. Abbildung 6-13 (Dreizylinder-Serienaggregat) Korrelations-analysen jener Kraftstoffe aus obiger Abbildung 6-11 zu sehen, welche eine ähnliche bzw. gleiche ROZ besitzen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

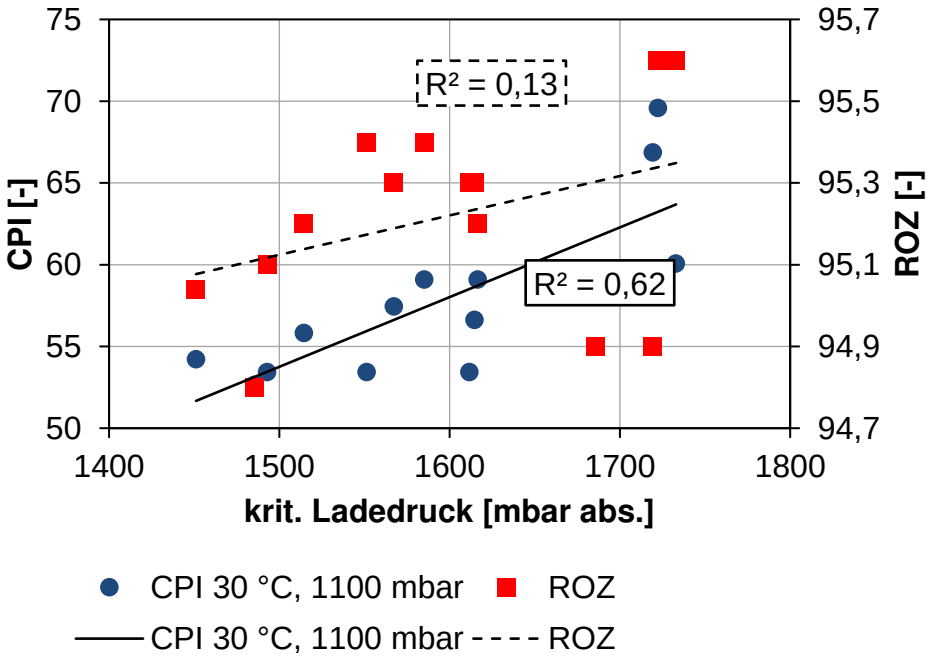


Abbildung 6-12: Korrelationsanalyse der CPI bzw. ROZ und dem kritischen Ladedruck am Einzylinder-Forschungsmotor. Die Kraftstoffauswahl umfasst Proben ähnlicher bzw. gleicher ROZ (ROZ95).

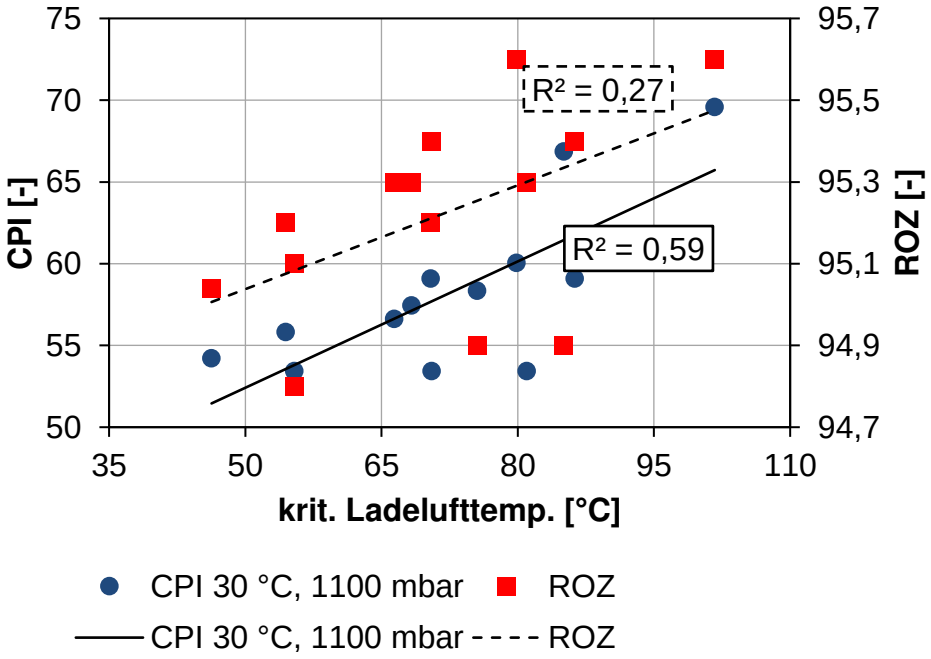


Abbildung 6-13: Korrelationsanalyse der CPI bzw. ROZ und der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat. Die Kraftstoffauswahl umfasst Proben ähnlicher bzw. gleicher ROZ (ROZ95).

Vergleicht man nun den Wertebereich der jeweiligen Ordinaten, so wird deutlich, dass beim modifizierten CPI-Verfahren die Resultate einen größeren Bereich umfassen als es

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

bei der ROZ der Fall ist. Die entwickelte Methodik bietet somit das Potenzial der reproduzierbaren Vorentflammungsbewertung von Kraftstoffen gleicher ROZ (ROZ-Vergleichbarkeit entspricht 0,7 OZ bei Messung derselben Probe [100]), jedoch unterschiedlicher Vorentflammungscharakteristik.

Da die Adaption einer Ladeeinheit einen zusätzlichen Komplexitätsgrad des potenziellen Prüfmotors bildet, stellt sich die Frage, ob nicht bereits die Reduktion der Ansauglufttemperatur zu hinreichend genauen CPI-Daten führt. Um diesen Sachverhalt zu klären, werden folgend die Ergebnisse der CPI bei 30 °C und 1100 mbar Ladedruck mit jenen gemessen bei 30 °C und atmosphärischen Bedingungen verglichen. In Abbildung 6-14 ist hierzu die Differenz der ermittelten CPI (CPI bei 30 °C, 1100 mbar minus CPI 30 °C, atmosphärisch), von links beginnend mit der höchsten Differenz, aufgetragen.

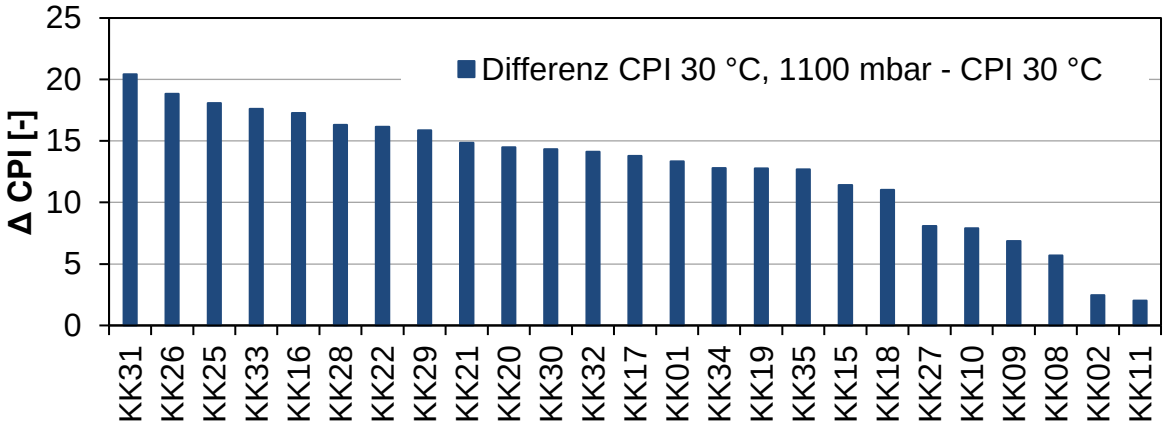


Abbildung 6-14: Einfluss der Druckerhöhung auf die ermittelte CPI unter konstanter Ansauglufttemperatur (30 °C).

Offensichtlich wirkt sich die Druckerhöhung unterschiedlich stark auf die Selbstzündungsneigung der Kraftstoffe aus und einzelnen Proben wird unter einem erhöhten Druckniveau ein höheres Potenzial zugesprochen. So zeigt KK31 die höchste Drucksensitivität infolge des gesteigerten Druckes wogegen KK11 kaum einen Einfluss auf die CPI erkennen lässt. Betrachtet man zusätzlich die Kraftstoffzusammensetzung der Proben ist festzuhalten, dass speziell Kraftstoffe hohen Isooktan- bzw. n-Heptan-Anteiles (Match Blends) eine geringere CPI-Differenz aufweisen. Dies wird in Abbildung 6-15 deutlich. Die Reihenfolge der Kraftstoffe ist gleichbleibend zu obiger Darstellung.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

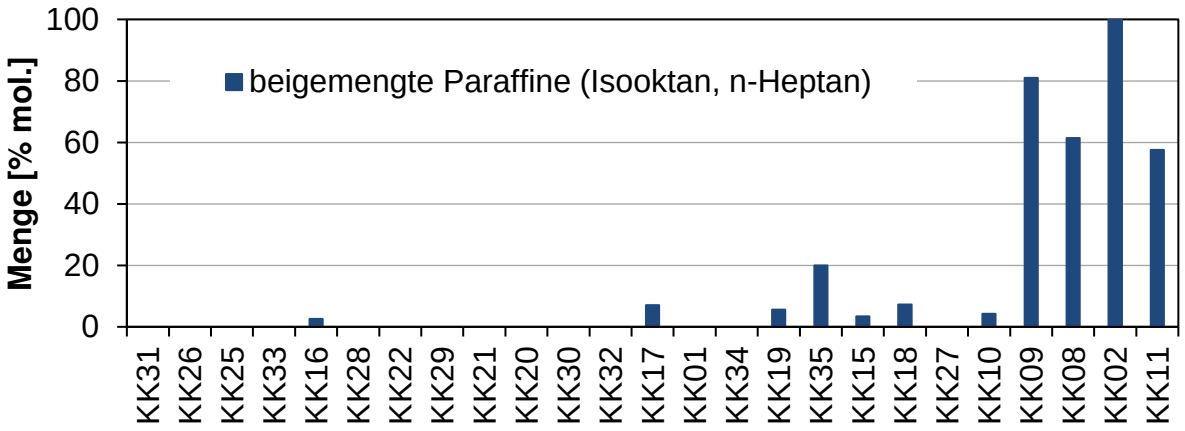


Abbildung 6-15: Molarer Anteil des zugemischten Isooktans bzw. n-Heptans (Match Blends).

Inwiefern sich die CPI-Ladedruckanhebung auf die Qualität der Korrelationsanalysen auswirkt ist in Abbildung 6-16 zu sehen.

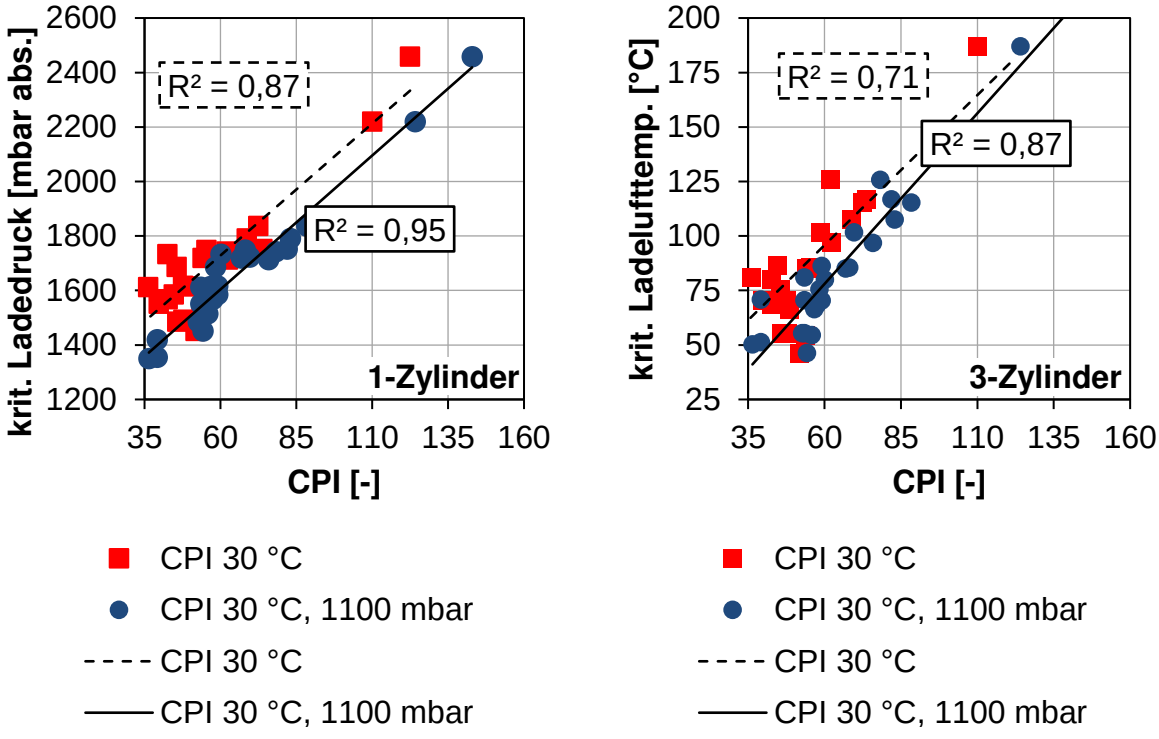


Abbildung 6-16: Korrelationsanalyse der CPI 30 °C im Vergleich zur CPI 30 °C, 1100 mbar (modifizierte CPI) und dem kritischen Ladedruck am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat (ohne KK31). KK03 und die CFD Surrogate sind in der Auswertung nicht enthalten.

Sowohl die Ergebnisse des Einzylinder-Forschungsmotors betreffend als auch des Dreizylinder-Serienaggregates (blaue Punkte; durchgezogene Korrelationsgerade) ist eine Verbesserung des Bestimmtheitsmaßes R^2 zu beobachten. Lässt man jene

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Kraftstoffe hohen Alkoholgehaltes (KK31 und KK32) aus der Analyse aus so wird die Signifikanz der Druckanhebung zusätzlich verdeutlicht (siehe Abbildung 6-17).

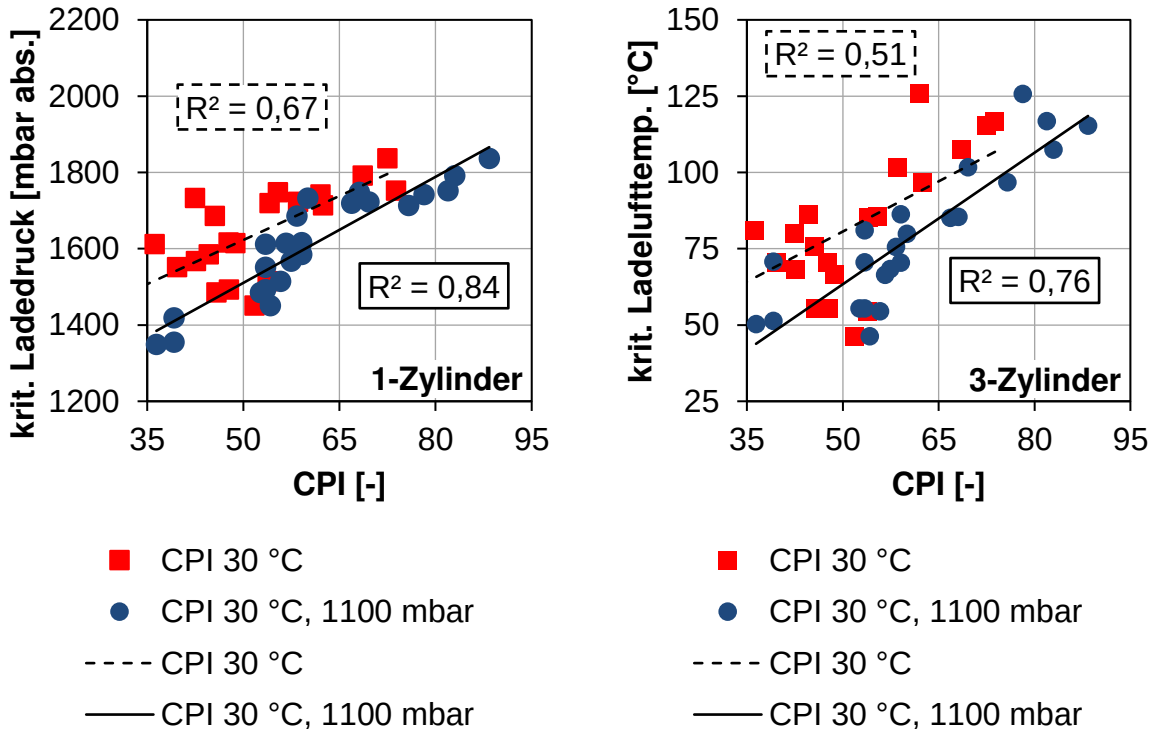


Abbildung 6-17: Korrelationsanalyse der CPI 30 °C im Vergleich zur CPI 30 °C, 1100 mbar (modifizierte CPI) und dem kritischen Ladedruck am Einzylinder-Forschungsmotor und der kritischen Ladelufttemperatur am Dreizylinder-Serienaggregat. Folgende Kraftstoffe sind zur direkten Vergleichbarkeit der Ergebnisse beider Motoren nicht enthalten: KK03, KK31 und KK32 sowie die CFD Surrogate.

Folgendes ist auf Basis der CPI-Validierungsuntersuchungen festzuhalten:

- Chemische sowie physikalische Kraftstoffeigenschaften lassen keine belastbaren Zusammenhänge zur Vorentflammungscharakterisierung ableiten.
- Die normgerechten Kennzahlen ROZ und MOZ geben ebenfalls keine Möglichkeit der qualitativen Bewertung. Kraftstoffe gleicher ROZ zeigen signifikante Unterschiede in deren Vorentflammungsreaktivität.
- Aufgrund der zu modernen Motoren abweichenden In-Zylinder-Bedingungen des CFR-Motors ist das CPI-Verfahren nach [1], [6] zu adaptieren, um die temperaturabhängige Selbstzündungscharakteristik der Kraftstoffe zu berücksichtigen.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

- Unter einer reduzierten Ansauglufttemperatur (30 °C) und einem Ladedruck von 1100 mbar abs. ist eine signifikante Verbesserung der Übertragbarkeit der CPI auf das Vorentflammungsverhalten der Kraftstoffe in modernen Motoren gegeben. Ursache dessen ist die Vergleichbarkeit der Betriebsrandbedingungen zu modernen Motoren. Die signifikante Temperaturabhängigkeit der kraftstoffspezifischen Selbstzündungsneigung macht vergleichbare Randbedingungen des Prüfaggregates zu modernen Motoren notwendig.

6.1.2 Glühzündung - HSPI

Abseits der CPI wurde in [1], [6] ebenfalls eine Kennzahl zur Beschreibung der kraftstoffspezifischen Glühzündungsneigung entwickelt. Die sogenannte Hot Spot Pre-Ignition Methodik, kurz HSPI, nutzt einen mit einem Thermoelement ausgestatteten Glühstift zur Darstellung eines definiert aufgeheizten Hot Spots im Brennraum.

Die HSPI wurde wie die CPI auf Basis hochalkoholhaltiger Kraftstoffe entwickelt und soll in dieser Arbeit auf deren Übertragbarkeit betreffend DIN EN 228 konformen Benzinen bzw. Kraftstoffen ohne Alkohol geprüft werden.

Da von einer Glühstiftadaption des Dreizylinder-Serienmotors abgesehen wurde sind die folgenden Untersuchungen zur Validierung des Verfahrens ausschließlich am Einzylinder-Forschungsmotor des VKA der RWTH Aachen University durchgeführt worden.

Wie bereits bei der CPI wurden umfassende Analysen zur Ermittlung eines potenziellen Zusammenhanges der chemischen bzw. physikalischen Kraftstoffeigenschaften und des Glühzündungsverhaltens vorgenommen. Als Bewertungsparameter der kraftstoffspezifischen Glühzündungsneigung im Betrieb des Einzylinder-Forschungsmotors wird jene kritische Glühstifttemperatur herangezogen, welche zu einer Glühzündungshäufigkeit von 2% der gemessenen Zyklen führt.

Da die Kraftstoffe KK33, KK34 und KK35 zu einem späteren Zeitpunkt des Projektverlaufes hinzugefügt wurden, konnten diese nicht hinsichtlich deren Glühzündungsverhalten untersucht werden.

Bei Betrachtung der relevanten Kraftstoffparameter der realen Kraftstoffmischungen (exklusive CFD Surrogate) in Abbildung 6-18 ist festzustellen, dass analog der Gasphasenvorentflammung, die Information der Stoffgruppenanteile keinen Rückschluss auf das Glühzündungsverhalten zulässt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

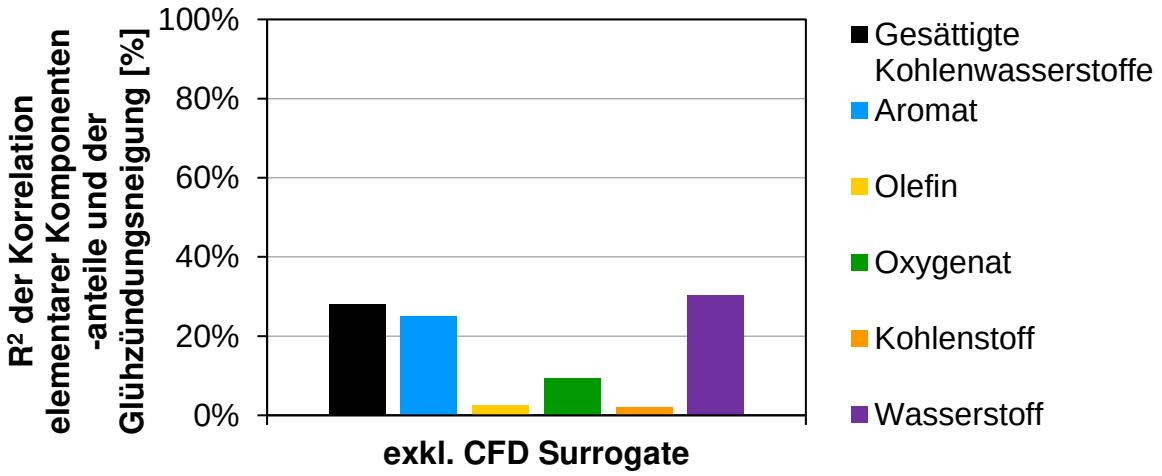


Abbildung 6-18: Bestimmtheitsmaß R^2 der linearen Korrelationen zwischen der kritischen Glühstifttemperatur gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor und **elementarer Komponentenanteile** im Kraftstoff.

Ein ähnliches Resultat zeigt sich bei Analyse der physikalischen Eigenschaften der Kraftstoffe. Abbildung 6-19 umfasst zur exemplarischen Illustration einen Auszug der Korrelationsanalysen relevanter Parameter.

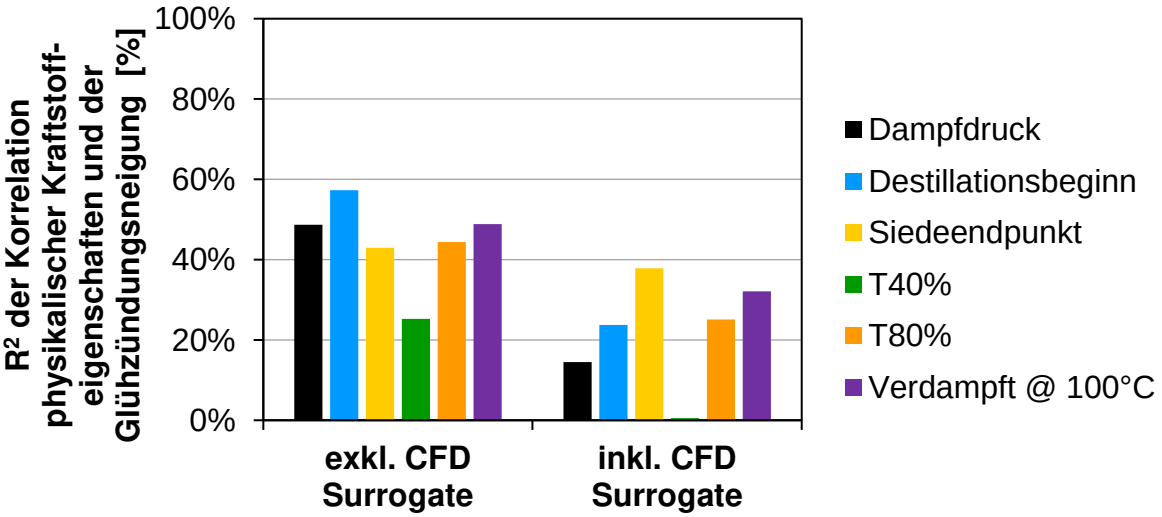


Abbildung 6-19: Bestimmtheitsmaß R^2 der linearen Korrelationen zwischen der kritischen Glühstifttemperatur gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor und **physikalischer Kraftstoffeigenschaften**.

Unter Berücksichtigung der CFD Surrogate zeigt Abbildung 6-19 ein noch schlechteres Ergebniss.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Zusammengefasst ist auch im Fall der Glühzündung das Kraftstoffpotenzial nicht auf eine spezifische Stoffgruppe oder eine chemische bzw. physikalische Eigenschaft des Kraftstoffes zu reduzieren.

Die Analyse der relevanten Kraftstoffkennzahlen in Abbildung 6-20 lässt ebenfalls keine Prognostizierbarkeit der Glühzündungsreaktivität anhand empirischer Mehoden ableiten. Dies ist grundsätzlich wenig überraschend, da keine der genormten Kennzahlen auf die Bewertung des Glühzündungsneigung abzielt. Interessant ist, dass die HSPI ein signifikant schlechtes Ergebnis liefert. Trotz sehr ähnlicher Messmethdoik wurde an den beiden Aggregaten (DE-CFR-Motor und Einzylinder-Forschungsmotor) eine deutlich abweichende Glühzündungscharakteristik der Kraftstoffe beobachtet.

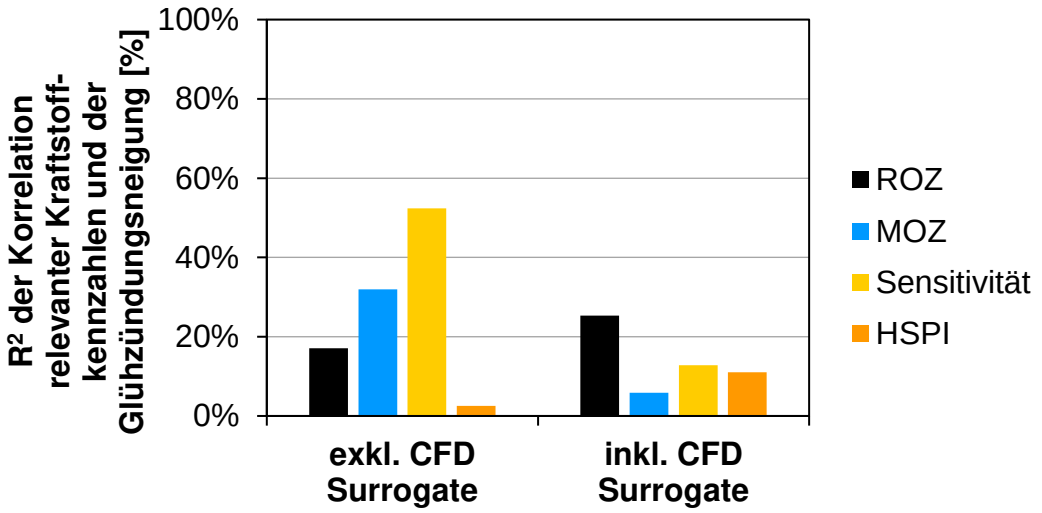


Abbildung 6-20: Bestimmtheitsmaß R^2 der linearen Korrelationen zwischen der kritischen Glühstifttemperatur gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor und den **relevanten Kraftstoffkennzahlen** gemessen am CFR-Motor bzw. DE-CFR-Motor (HSPI).

Um die Ursache der deutlich unterschiedlichen Glühzündungstendenzen zu identifizieren, wurden umfassende numerische Strömungssimulationen der Zylinderinnenströmung des Einzylinder-Forschungsmotors am VKA der RWTH Aachen University durchgeführt. Bzgl. der Simulationsdetails sei auf [7] verwiesen.

Die Simulationen sahen eine zeitlich und örtlich konstante Glühstiftoberflächentemperatur vor. Diese wurde solange variiert, bis eine lokale Zündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches in unmittelbarer Nähe der Glühstiftspitze erfolgte.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

In Abbildung 6-21 ist im linken Diagramm (a) die mittlere Brennraumtemperatur für drei verschiedene Simulationen mit Isooktan dargestellt [7]:

- Glühstifttemperatur von 740 °C
- Glühstifttemperatur von 790 °C
- Glühstifttemperatur von 790 °C unter Ausschluss chemischer Reaktionen (inert)

Alle Simulationen enthalten ein stöchiometrisches Luft-Kraftstoff-Gemisch, wobei im Fall der inerten Simulation die chemische Reaktionsfähigkeit des Gemisches unterdrückt wurde.

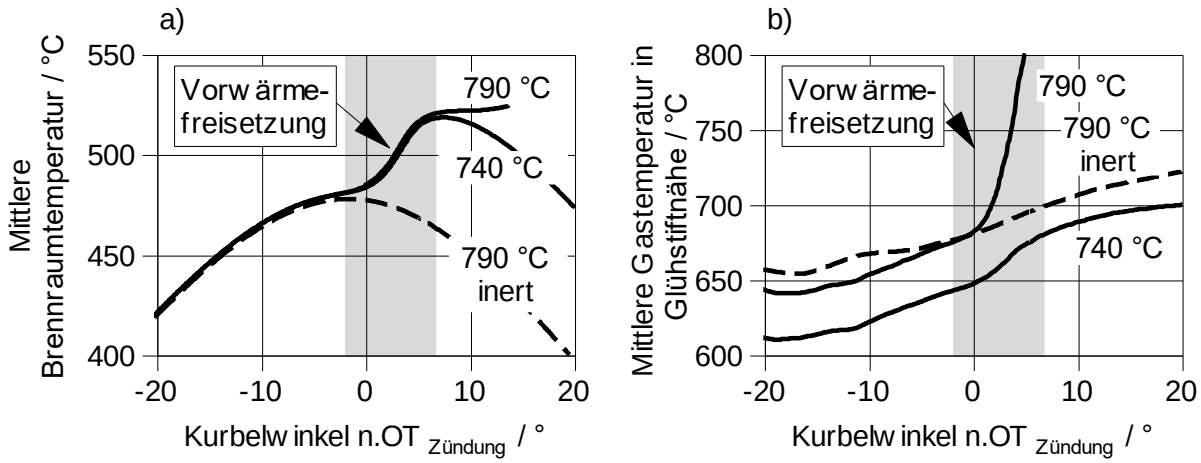


Abbildung 6-21: Mittlere Brennraumtemperatur (a) und Gastemperatur in unmittelbarer Umgebung des Glühstiftes (b) aus CFD-Simulationen zur Glühzündung am Einzylinder-Forschungsmotor. Simulation mit Isooktan und zwei verschiedenen Glühstiftoberflächentemperaturen (740 °C und 790 °C) [7], [122].

Vergleicht man das Temperaturniveau beider Diagramme, so ist festzustellen, dass die Gastemperatur in Glühstiftnähe (Diagramm (b)) deutlich höher ist als jene im Zylindermittel. Die heiße Glühstiftoberfläche überträgt somit Wärme an das umgebende Gas und heizt dieses auf.

Zusätzlich zum Wärmeeintrag des Glühstiftes kommt es zu einer zusätzlichen Erwärmung aus chemischen Reaktionen. Bei Betrachtung des Kurbelwinkelbereiches zwischen ca. 0 °KW und 7 °KWnZOT sieht man anhand des Diagrammes (a) einen deutlichen Anstieg der mittleren Brennraumtemperatur infolge chemischer Wärmefreisetzung, welche bei der inerten Simulation nicht zu erkennen ist. Ein vollständiger Umsatz des Gemisches bleibt im Fall von 740 °C jedoch aus. Die Temperatur fällt nach anfänglicher Zunahme wieder ab, wodurch diese Art der Wärmefreisetzung im Weiteren als Vorwärmfreisetzung bezeichnet wird. Bei 790 °C geht

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

die Vorwärmefreisetzung in den vollständigen Gemischumsatz durch Selbstzündung über.

Das soeben beschriebene Verbrennungsverhalten lässt sich experimentell bestätigen. Abbildung 6-22 zeigt hierzu einen Ausschnitt des Zylinderdruckverlaufes verschiedener CFD Kraftstoffproben während des Glühzündungsexperimentes am Einzylinder-Forschungsmotor. Es ist deutlich zu erkennen, dass nach einem anfänglichen Druckanstieg nach dem oberen Totpunkt der vollständige Umsatz des Gasgemisches ausbleibt und der Druckverlauf durch die Expansion bereits wieder abnimmt. Die eigentliche Verbrennung erfolgt nach regulärer Zündeinleitung deutlich später als im hier dargestellten Kurbelwinkelbereich. Die zu beobachtende Vorwärmefreisetzung ist kennzeichnend für die 1. Zündstufe NTK-behafteter Kraftstoffe [7].

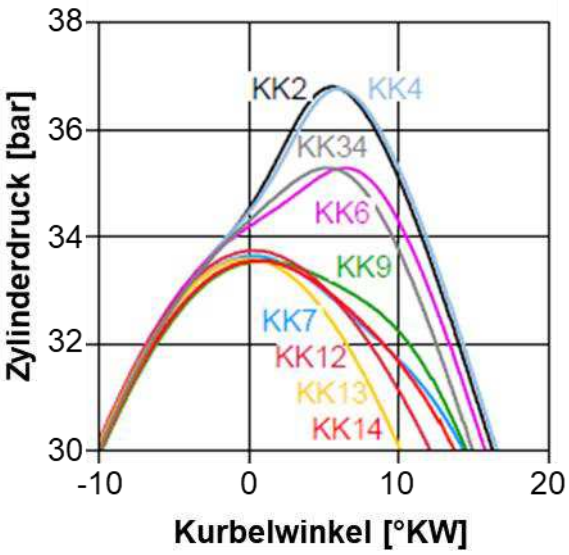


Abbildung 6-22: Identifikation der Vorwärmefreisetzung (1. Zündstufe) anhand der Zylinderdruckkurven des Glühzündungsexperiments am Einzylinder-Forschungsmotor [122].

Infolge der erhöhten mittleren Brennraumtemperatur durch die eben gezeigte Vorwärmefreisetzung kommt es zum unmittelbaren Anstieg der mittleren Gastemperatur in Glühstiftnähe und dementsprechend zur gesteigerten Gemischreaktivität am Glühstift. Auch bei ausbleibender Selbstzündung des Gemisches (740 °C -Kurve) ist bei der Simulation in Diagramm (b) ein erhöhter Temperaturgradient der mittleren Gastemperatur in Glühstiftnähe im Kurbelwinkelbereich der Vorwärmefreisetzung zu erkennen [7].

Auf Basis dieser Simulation ist ein Zusammenhang zwischen der mittleren Brennraumtemperatur und der Gastemperatur in Glühstiftnähe zu beobachten. Des Weiteren ist zu berücksichtigen, dass die kraftstoffspezifische Vorwärmefreisetzung

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

einen unmittelbaren Zusammenhang mit der Gastemperatur in Glühstiftnähe und somit der Reaktivität des Gasgemisches zu haben scheint [7].

Abseits der thermodynamischen Zustandsgrößen ist ebenfalls ein nicht zu vernachlässigender Strömungseinfluss auf die kraftstoffspezifische Glühzündungsneigung zu verzeichnen. In [7] wurde hierzu eine zweidimensionale Strömungssimulation unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen in der Gasphase vorgenommen. Ein definiertes Luft-Kraftstoff-Gemisch strömt unter verschiedenen stationären thermodynamischen Randbedingungen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit senkrecht zu einer heißen Oberfläche. Eine detaillierte Beschreibung der Randbedingungen bzw. zugrundeliegenden Annahmen der Strömungssimulation gibt [7], [122]. Die folgende Analyse dient lediglich der qualitativen Beschreibung der Selbstzündungscharakteristik und stellt eine demensprechende Simplifizierung dar.

In Abbildung 6-23 ist das Ergebnis dieser Untersuchung auf Basis eines PRF95, reinen Isooktans bzw. reinen Ethanols zu sehen. Die Oberflächentemperatur wurde in der Simulation sukzessive reduziert bis ein Zündzeitpunkt oberhalb von 10 ms eintrat. Die Zeitspanne bis 10 ms entspricht einem Kurbelwinkelbereich von 90 °KW bei einer Motordrehzahl von 1500 U/min, wie es bei den Glühzündungsuntersuchungen des Einzylinder-Forschungsmotors der Fall war. Somit stellt das Intervall 0-10 ms den für eine potenzielle Glühzündung relevanten Zeitbereich dar [7].

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

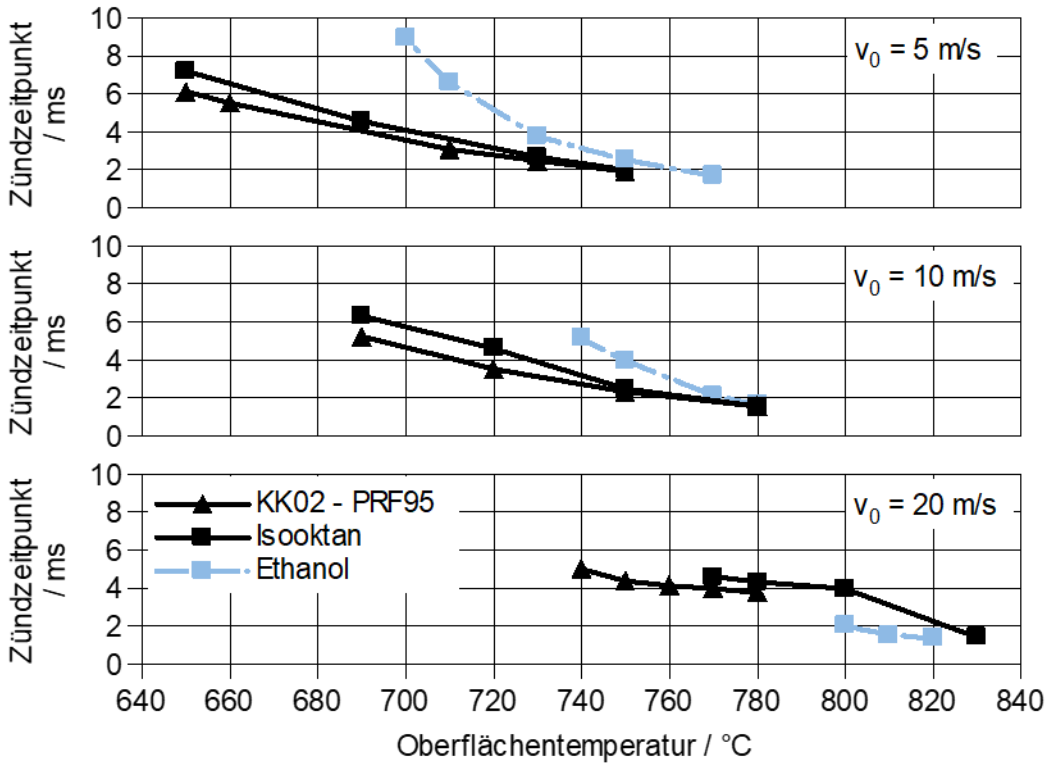


Abbildung 6-23: Numerische Untersuchung zur Oberflächenzündung unter Einfluss einer zweidimensionalen Strömung über eine heiße Wand [7], [122].

Anhand der Daten ist ein **signifikanter Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit** auf die Glühzündungsneigung der Kraftstoffproben zu erkennen. Folgende Erkenntnisse sind abzuleiten:

- Mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit sind höhere Oberflächentemperaturen zur Selbstzündung der Proben notwendig. So zündet beispielsweise Ethanol bei einer Geschwindigkeit von 5 m/s bei 700 °C wogegen bei 20 m/s die notwendige Oberflächentemperatur 800 °C beträgt.
- Der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit auf die Selbstzündungssensitivität der Kraftstoffe ist unterschiedlich stark ausgeprägt. Zeigen PRF95 und Isooktan bei 5 m/s annähernd gleiche Oberflächentemperaturen zur Zündung innerhalb von 10 ms (ca. 650 °C), so ist dies bei 20 ms nicht mehr der Fall.
- Bei Betrachtung des Zeitintervalls von 0-2 ms kehrt sich mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit das Selbstzündungsranking von Isooktan und Ethanol um.

Auf Basis dieser Analysen ist nachzuvollziehen, dass bei der Oberflächenzündung nicht ausschließlich die Hochtemperaturkinetik maßgebend ist, sondern neben der

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

kraftstoffspezifischen Niedertemperaturkinetik (Vorwärmefreisetzung) ebenfalls die Strömungsbedingungen entscheidend sind.

Inwiefern sich das Glühzündungsverhalten in modernen Aggregaten unter Kenntnis der soeben beschriebenen Einflussparameter auf einem CFR-Motor basierenden Prüfverfahren abbilden lässt, wird folgend bewertet.

Abbildung 6-24 stellt das Ergebnis der Glühzündungscharakteristik am Einzylinder-Forschungsmotor den Resultaten am modifizierten DE-CFR-Motor gegenüber. Die HSPI entspricht gemäß Gleichung 3-3 einem gemessenen Temperaturwert.

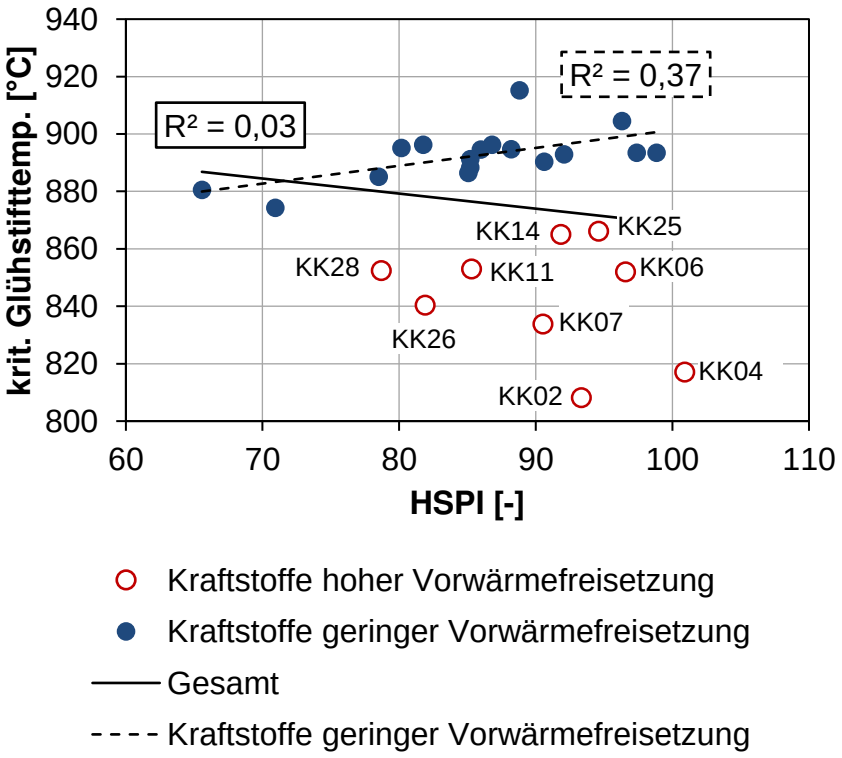


Abbildung 6-24: Korrelation der kritischen Glühstifttemperatur gemessen am Einzylinder-Forschungsmotor und der am modifizierten DE-CFR-Motor ermittelten HSPI.

Wie bereits in Abbildung 6-20 aufgezeigt, führt die HSPI nach [1], [6] unter Berücksichtigung der Real- sowie CFD Kraftstoffe zu keinem zufriedenstellenden Ergebnis. Bei detaillierter Betrachtung der Daten ist festzustellen, dass nur einzelne Kraftstoffe deutliche Differenzen in Abhängigkeit des Versuchsträgers zeigen. Dies betrifft vordergründlich die CFD Surrogate aber auch die Splash Blends KK25, KK26 und KK28. Folgend ist in Abbildung 6-25 das Ergebnis der RCM Analysen aller Kraftstoffe aufgezeigt; die rotgestrichelten Kurvenverläufe entsprechen hierbei den gemessenen Zündverzugszeiten jener Proben, welche in Abbildung 6-24 signifikant außerhalb der Korrelation liegen. Im Bereich zwischen 1,3 bis 1,5 inverser Temperatur zeigen eben

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

diese Kraftstoffe eine zu den übrigen Proben deutlich kürzere Zündverzugszeit bzw. höhere Reaktivität.

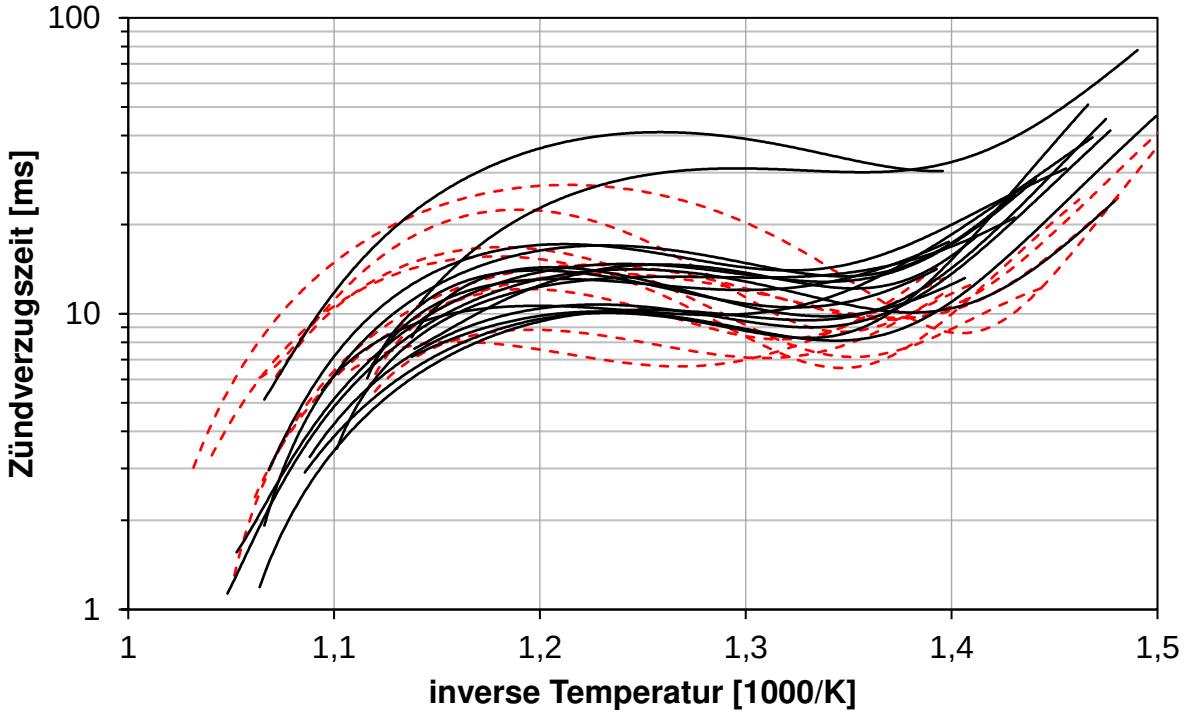


Abbildung 6-25: An der RCM gemessene Zündverzugszeiten der Kraftstoffe KK01 bis KK32.

Dieses Ergebnis verdeutlicht die Signifikanz der kraftstoffspezifischen Niedertemperaturkinetik. Es bestätigt des Weiteren die zuvor getätigte Schlussfolgerung, dass die in der Simulation und am Einzylinder-Forschungsmotor beobachtete Vorwärmefreisetzung in der 1. Zündstufe begründet liegt, da diese Kraftstoffe ein ausgeprägtes NTK-Verhalten aufweisen.

Ausgehend von der unzureichenden Korrelation der HSPI ist davon auszugehen, dass die thermodynamischen Randbedingungen des HSPI-Verfahrens, wie bereits im Fall der CPI, deutlich von jenen Randbedingungen des modernen Einzylinder-Forschungsmotors abweichen. Darüber hinaus ist anzunehmen, dass ebenfalls die Strömungsbedingungen, welche nach Abbildung 6-23 von Relevanz sind, Unterschiede aufweisen. Zum einen, da das Brennverfahren des CFR-Motors in den 1930er Jahren entwickelt wurde und der Einzylinder-Forschungsmotor ein modernes Tumble-Brennverfahren besitzt, zum anderen wird der Motor bei der HSPI mit einer Drehzahl von 900 U/min betrieben und somit um 600 U/min langsamer als das moderne Aggregat.

Gleich den Simulationsuntersuchungen in Abbildung 6-9 wurde die Selbstzündungscharakteristik unter HSPI-Randbedingungen am PCFC der RWTH

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Aachen University analysiert. Abbildung 6-26 zeigt das Ergebnis der simulierten Zündverzugszeiten unter HSPI-Betriebsbedingungen für den Basismischkraftstoff KK03 sowie die Randbedingungen der Glühzündungsuntersuchung desselben Kraftstoffes am Einzylinder-Forschungsmotor. Der Kurbelwinkelbereich der Berechnung umfasst die Kompression bis zum Eintritt der Selbstzündung. Der Einfluss einer heißen Oberfläche (Glühstift) wurde in der Simulation nicht berücksichtigt, sondern lediglich die Bedingungen infolge des Kompressionshubes.

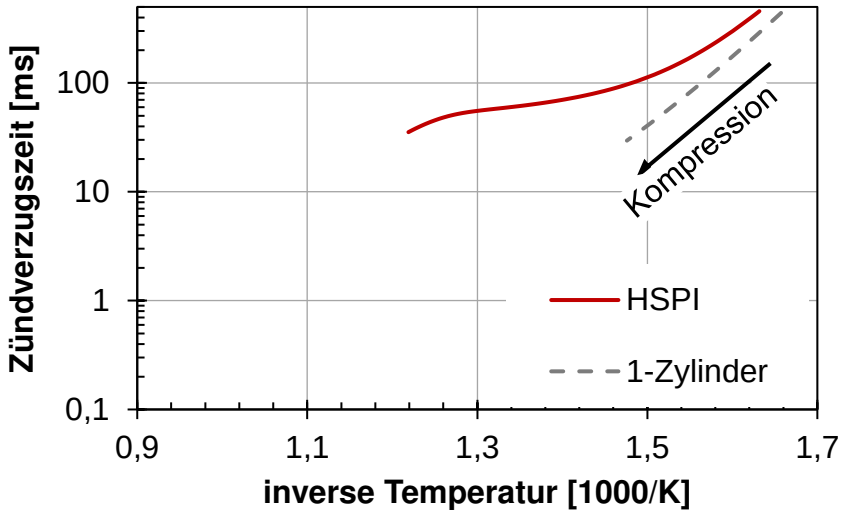


Abbildung 6-26: Simulation der Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Randbedingungen während des HSPI-Verfahrens und der Glühzündungs-untersuchungen am Einzylinder-Forschungsmotor.

Aufgrund des geringeren Saugrohrdruckes bzw. des niedrigeren Verdichtungsverhältnisses am DE-CFR-Motor wird die Zylinderladung in andere reaktionskinetische Regime versetzt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Gasphase im Zylinder beider Motoren thermodynamisch nicht ausreichend kritisch ist, um eine Selbstzündung zu initiieren. Dies zeigt sich darin, dass bei den in der Kompression vorliegenden mittleren Brennraumdrücken und -temperaturen die Zündverzugszeit nicht hinreichend kurz wird (> 10ms). Das ist insofern verständlich, da die Simulation die thermodynamischen Bedingungen in Abwesenheit des Glühstiftes bewertet und eine Selbstzündung im Experiment lediglich durch das Aufheizen des Glühstiftes hervorgerufen wird. Da die kürzesten Zündverzüge beider Verfahren in sehr unterschiedlichen Temperaturbereichen auftreten, ist eine abweichende Charakteristik der Kraftstoff zu erwarten.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Die motorspezifische Zündcharakteristik spiegelt sich nicht ausschließlich in den Glühzündungstendenzen der Kraftstoffe wider, sondern ebenfalls in der mittleren zur Selbstzündung notwendigen Glühstifttemperatur. Abbildung 6-27 zeigt hierzu die gemittelte kritische Glühstifttemperatur aller gemessenen Kraftstoffe.

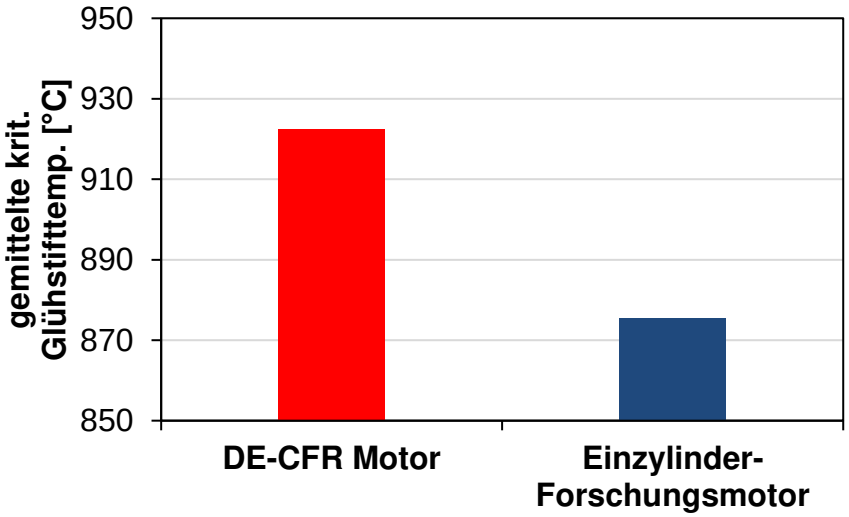


Abbildung 6-27: Mittlere kritische Glühstifttemperatur basierend auf den Messergebnissen aller untersuchten Proben.

Aufgrund der nach Abbildung 6-26 unkritischeren thermodynamischen Randbedingungen im Zylinder des DE-CFR-Motors und unter Berücksichtigung der anzunehmenden abweichenden Strömungsbedingungen ist eine deutlich höhere durchschnittliche Glühstifttemperatur zur Initiierung einer Selbstzündung bei der HSPI-Methodik zu beobachten.

Analog der Überlegung beim CPI-Verfahren wurde die HSPI ebenfalls unter geänderten Betriebsbedingungen analysiert. Eine Reduktion der Ansaugluftemperatur von 149 °C auf 50 °C hat in diesem Zusammenhang jedoch keine Verbesserung hinsichtlich der Übertragbarkeit der Ergebnisse gezeigt (siehe Abbildung 6-28). Am anschaulichsten illustrieren dies Kraftstoff KK02 (PRF95) und KK11 (Cyclohexan Match Blend) in Abbildung 6-29. Das Experiment wurde zusätzlich um die Messung bei 30 °C Ansaugluftemperatur erweitert.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

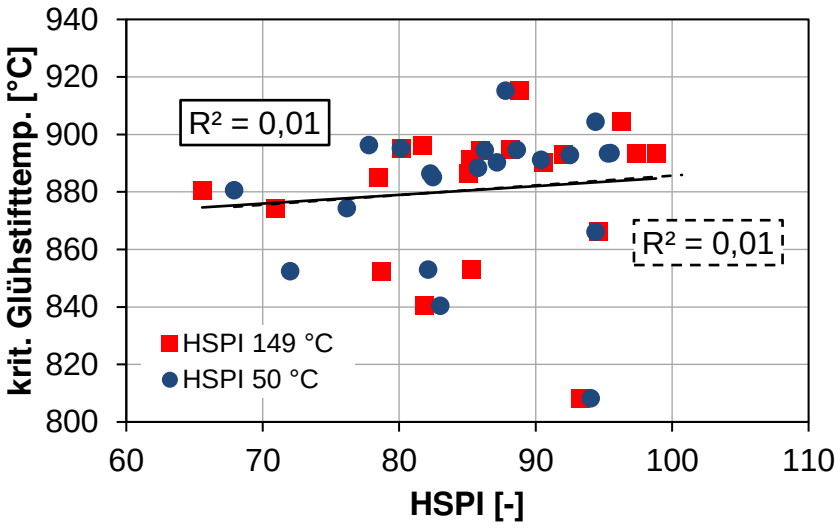


Abbildung 6-28: Vergleich der Übertragbarkeit der HSPI bei 149 °C Ansauglufttemperatur und 50 °C Ansauglufttemperatur auf die Ergebnisse der Glühzündungsuntersuchungen am Einzylinder-Forschungsmotor.

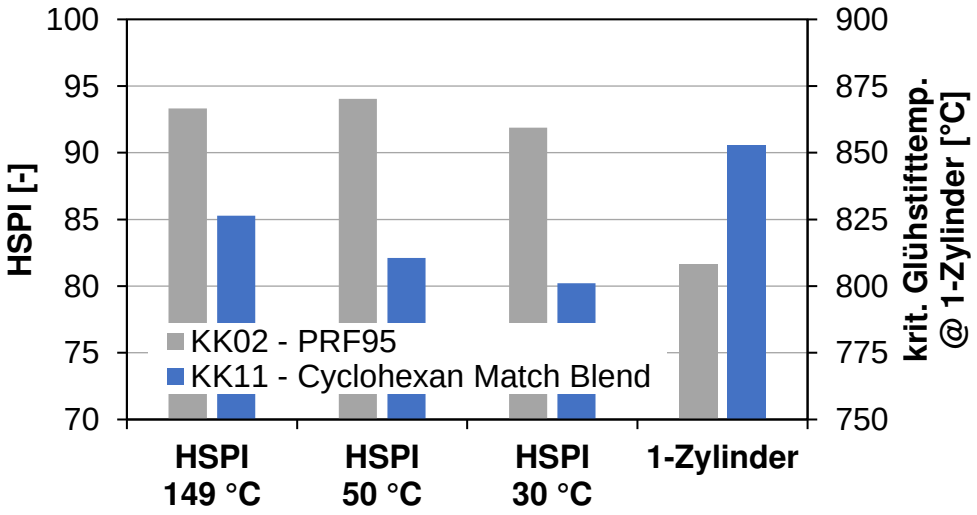


Abbildung 6-29: Differenz der Glühzündungscharakteristik am DE-CFR-Motor unter verschiedenen Ansauglufttemperaturen und am Einzylinder-Forschungsmotor.

Trotz der signifikant kühleren Ansauglufttemperatur lässt sich keine Verbesserung der Ergebnisse erkennen. Ist beim CFR-Aggregat Kraftstoff KK02 deutlich glühzündungsresistenter als KK11, so ist dies beim Einzylinder-Forschungsmotor genau umgekehrt. Dieses Ergebnis untermalt, dass abseits der Temperatur noch weitere wesentliche Einflussparameter vorliegen müssen.

Weiterführende Untersuchungen unter erhöhtem Ladedruck konnten im Fall der Oberflächenzündung nicht durchgeführt werden. Die erhöhte Ladungsdichte bewirkt eine

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

höhere Kraftstoffmasse im Zylinder, welche wiederum eine höhere Leistung des Glühstiftes zur Erwärmung des Gemisches erfordert. Mit dem vorhandenen Glühstift war es nicht möglich unter aufgeladenem Motorbetrieb die notwendige Leistung zur Selbstzündung zur Verfügung zu stellen.

Zusammenfassung der Validierung der Glühzündungskennzahl HSPI:

- Analog der Gasphasenvorentflammungsanalysen ist auf Basis der chemisch-physikalischen Kraftstoffeigenschaften kein Bewertungsverfahren zur Charakterisierung der Glühzündungsneigung abzuleiten.
- ROZ, MOZ sowie die Sensitivität stehen in keinem Zusammenhang mit der Glühzündungsreaktivität im Einzylinder-Forschungsmotor.
- Im Fall einer Glühzündung ist nicht ausschließlich die Hochtemperaturkinetik ausschlaggebend. Speziell NTK-behaftete Kraftstoffe zeigen infolge der 1. Zündstufe in Abhängigkeit der thermodynamischen Randbedingungen eine unterschiedliche Glühzündungsreaktivität.
- Das nach [1], [6] entwickelte HSPI-Verfahren lässt keine Übertragbarkeit auf das Glühzündungsverhalten in einem modernen Aggregat zu.
- Eine signifikante Reduktion der Ansauglufttemperatur bei der HSPI-Methodik führt zu keiner Verbesserung im Ergebnis.
- Neben den thermodynamischen Randbedingungen ist die Strömungsgeschwindigkeit maßgebend für die Selbstzündungsreaktivität an einer heißen Oberfläche.

Fazit: Es ist weiterer Forschungsbedarf erforderlich.

6.1.3 Konventionelles Klopfen - DOZ

Abseits der beiden irregulären Verbrennungsphänomene Vorentflammung und Glühzündung, wurde auch das konventionelle Klopfen intensiv analysiert und bewertet. In [1], [6] wurde zur Charakterisierung hochalkoholhaltiger Kraftstoffe, die sogenannte DOZ, entwickelt, welche durch deren direkteinspritzenden Betrieb die hohe Verdampfungswärme der Alkohole berücksichtigt. Mit den folgenden Untersuchungen am Dreizylinder-Serienaggregat wird die Validierung des DOZ-Verfahrens auf Basis marktrelevanter Kraftstoffe durchgeführt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Abbildung 6-30 stellt das Klopfbewertungspotenzial des genormten ROZ- und MOZ-Verfahrens dar. Hierzu wird das Ergebnis der Klopfuntersuchung am modernen Dreizylinder-Aggregat den kraftstoffspezifischen Klopffestigkeiten (ROZ, MOZ) gegenübergestellt. Der klopfbegrenzte Zündzeitpunkt bzw. der klopfbegrenzte Umsatzschwerpunkt (MBF50%) dient der Bewertung des Klopfverhaltens im modernen Motor. Exemplarisch wird in nachfolgender Abbildung der Betriebspunkt 2 (BP2) gewählt (Tabelle 11 auf Seite 58), da dessen Randbedingungen (Ladedruck: 1,8 bar absolut, Ladelufttemperatur: 35 °C, Drehzahl: 1500 U/min) einen in modernen Motoren relevanten Betriebspunkt darstellt.

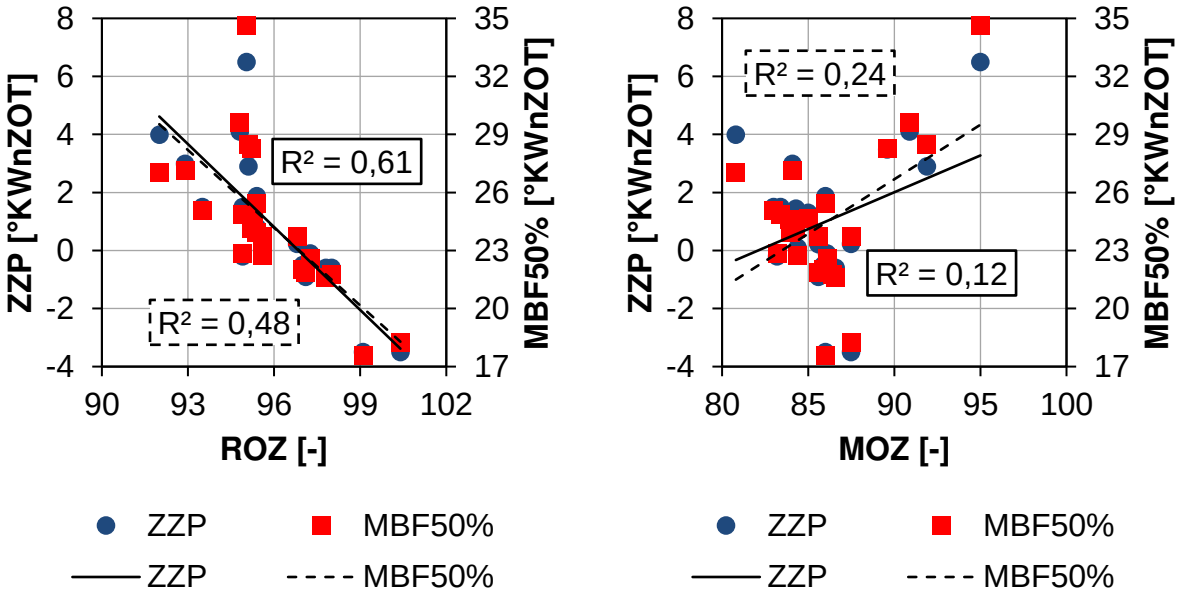


Abbildung 6-30: Korrelation des Klopfverhaltens am Dreizylinder-Serienaggregat (Betrieb an der Klopfgrenze, Betriebspunkt BP2) und der ROZ bzw. MOZ. Die Datenbasis umfasst alle Kraftstoffe mit Ausnahme der CFD Surrogate und den Kraftstoff KK03. ZZP…Zündzeitpunkt; MBF50%...Umsatzschwerpunkt

Mit einem maximalen Bestimmtheitsmaß R^2 von etwa 60 % zeigt sich unter den gewählten Randbedingungen eine mittels der ROZ unzureichende Prognostizierbarkeit des Klopfverhaltens in modernen Motoren. Die MOZ lässt unter den vorliegenden Betriebsbedingungen eine noch schlechtere Übertragbarkeit der Daten erkennen. Das abweichende Bestimmtheitsmaß R^2 zwischen ZZP und MBF50% liegt im kraftstoffspezifischen Brennverzug bzw. der Brenndauer begründet. Zusätzlich ist hervorzuheben, dass in diesem Betriebspunkt einzelne Kraftstoffe mit hoher MOZ deutlich früher klopfbegrenzt sind (positive Steigung der Korrelationsgeraden im Diagramm rechts) als jene geringerer MOZ. Dementsprechend ist abzuleiten, dass unter

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

den vorhandenen Betriebsbedingungen im Dreizylinder-Serienaggregat Kraftstoffe höherer Sensitivität ein günstigeres Klopfverhalten haben.

Nachfolgende Analysen nutzen lediglich den klopfbegrenzten Umsatzschwerpunkt (MBF50%) als Korrelationsbasis, da dieser thermodynamisch von höherer Relevanz ist. Abbildung 6-31 zeigt das Ergebnis aller untersuchten Betriebspunkte.

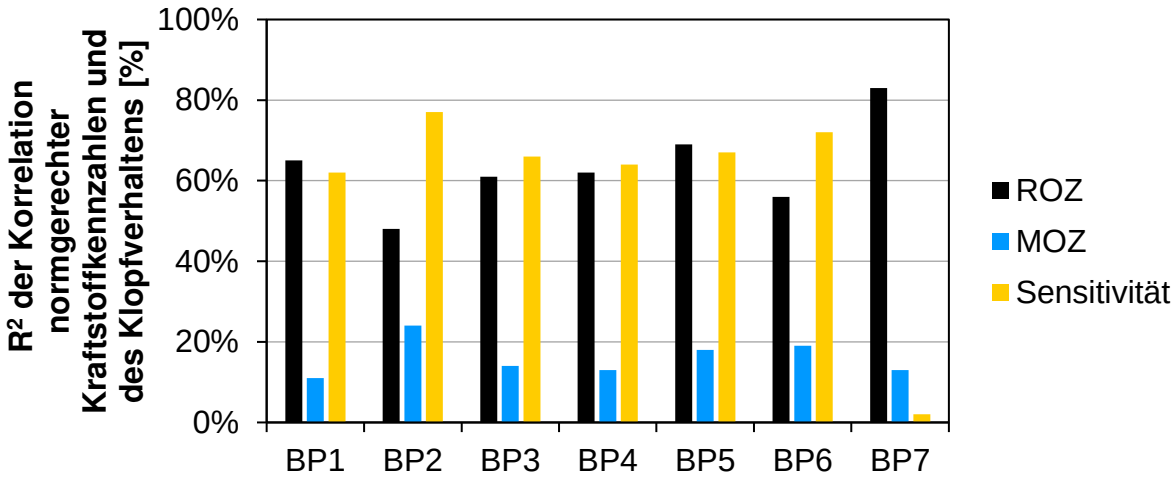


Abbildung 6-31: Bestimmtheitsmaße R^2 der linearen Regressionsanalysen betreffend alle untersuchten Betriebspunkte. Zur Klopfcharakterisierung im Dreizylinder-Serienmotor dient der Umsatzschwerpunkt der Verbrennung (MBF50%). Basis der Korrelation bildet, mit Ausnahme der CFD Surrogate und KK03, die gesamte Kraftstoffauswahl.

Es ist zu erkennen, dass die genormten Kraftstoffkennzahlen ROZ und MOZ (mit Ausnahme von BP7) keine belastbare Bewertung zulassen. Die Ursache, weshalb bei BP7 im Fall der ROZ ein Bestimmtheitsmaß > 80 % vorherrscht wird in den Betriebsbedingungen vermutet. Gemäß Tabelle 11 beträgt die Ladelufttemperatur 120 °C und entspricht somit in einem hohen Maß den Bedingungen des CFR-Motors. Betrachtet man die nach [5] auf Basis der MBF50%-Daten berechneten K-Werte der Betriebspunkte (Abbildung 6-32), so ist festzustellen, dass mit Ausnahme von BP7 alle Werte negativ sind. Als Datenbasis dient, mit Ausnahme von KK03 und der CFD Surrogate, die gesamte Kraftstoffmatrix. Wie bereits in Kapitel 2.4 erläutert, weist ein negativer K-Wert auf Betriebsbedingungen hin, welche deutlich von jenen der ROZ und MOZ abweichen bzw. sich nicht mehr innerhalb der thermodynamischen Randbedingungen der beiden Normprüfverfahren befinden. Eine geringere MOZ bei gleicher ROZ führt in diesem Zusammenhang zu einer besseren Klopfperformance des Kraftstoffes. Ein K-Wert von

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Null beschreibt ein Klopfverhalten gleich jenem der ROZ-Messung, wogegen ein Wert von 1 der MOZ gleich kommt (siehe Gleichung 2-7).

Durch die Ermittlung der K-Werte ist nachzuvollziehen, dass die ROZ in Abbildung 6-31 mit dem BP7-Resultat des Dreizylinder-Aggregates gut korreliert. Die Brennraumrandbedingungen des CFR-Motors sind offensichtlich vergleichbar mit den Bedingungen von BP7.

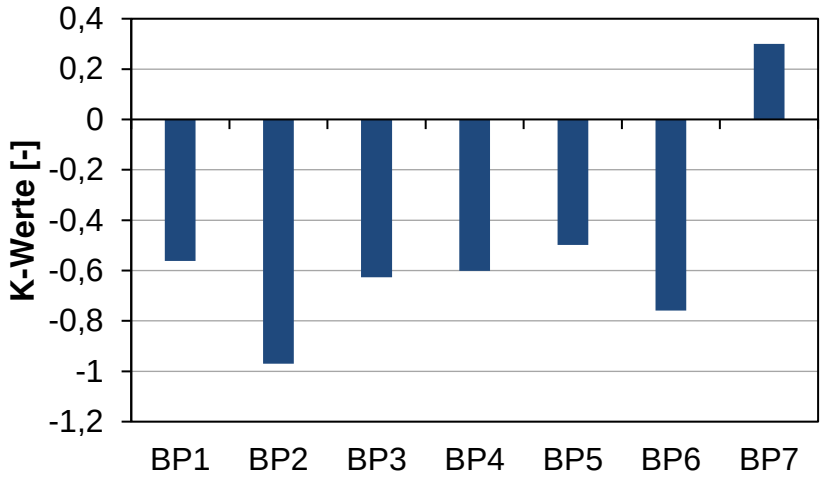


Abbildung 6-32: K-Faktor-Berechnung zur Gewichtung nach [5]. K=0 entspricht ROZ-Bedingungen, K=1 entspricht MOZ-Bedingungen (siehe Gleichung 2-7). Datenbasis bilden alle Kraftstoffe mit Ausnahme von KK03 und der CFD Surrogate.

Die Analyse der In-Zylinder-Temperatur in Abbildung 6-33 bestätigt die Annahme ähnlicher Betriebsbedingungen vollends. Die thermodynamischen Randbedingungen im Zylinder befinden sich bei Betriebspunkt 7 zwischen jenen des ROZ- und MOZ-Verfahrens, wogegen moderne Motoren grundsätzlich deutlich darunter liegen. Die Daten des Dreizylinder-Motors basieren auf der Messung des Kraftstoffes KK33 (EN 228 E5 Benzin).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

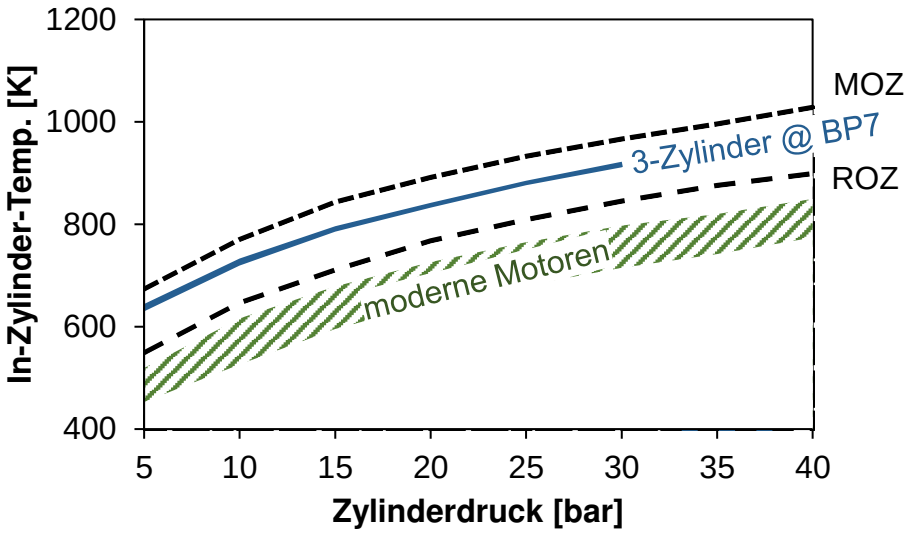


Abbildung 6-33: In-Zylinder-Bedingungen während des Kompressionshubes [114]. Darstellung ist erweitert um die Randbedingungen des Dreizylinder-Serienaggregates bei Betriebspunkt BP7 (Kraftstoff: DIN EN 228 E5 Benzin).

Hinsichtlich des hohen Bestimmtheitsmaßes der Sensitivität (Abbildung 6-31) zeigt die detaillierte Betrachtung der Korrelationsanalyse in Abbildung 6-34, dass diese von wenigen Kraftstoffen getragen wird.

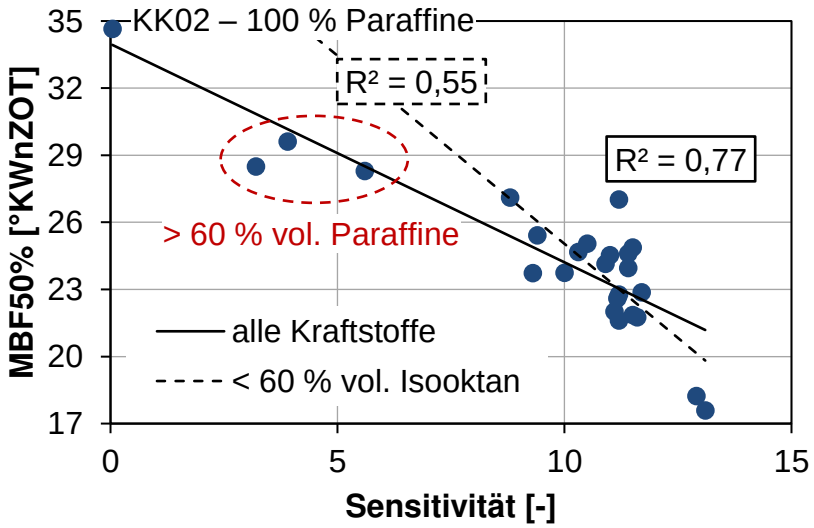


Abbildung 6-34: Korrelation der Klopfbewertung am Dreizylinder-Serienaggregat (Betrieb an der Klopfgrenze, Betriebspunkt BP2) und der ermittelten Sensitivität.

Infolge der Kraftstoffe hohen Isooktan-Anteiles (> 60 % vol. Isooktan) kommt es zu einem verzerrten Ergebnis der linearen Regression. Isooktan bzw. n-Heptan weisen gemäß Definition eine Sensitivität von 0 auf, wodurch Kraftstoffe hohen Gehaltes dieser Paraffine

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

eine dementsprechend geringe Sensitivität zeigen. Betrachtet man lediglich die marktrelevanten Benzine, so umfassen diese ein Sensitivitätsintervall von 8 bis 13. Innerhalb dieses Bereichs ist mit einem Bestimmtheitsmaß von 55 % keine belastbare Aussagekraft der Kennzahl gegeben. Grundsätzlich ist zu berücksichtigen, dass diese Korrelation „ungültig“ ist, da eine hohe Sensitivität eine geringe MOZ einschließt, was wiederum per Definition eine schlechte Klopfperformance widerspiegeln sollte. In Abbildung 6-34 ist das Gegenteil zu beobachten (negativer K-Wert).

Gleich den Untersuchungen in Kapitel 6.1.1 und Kapitel 6.1.2 wird die Klopfcharakteristik auf einen potenziellen Zusammenhang zu relevanten Stoffgruppen bzw. auf die Relevanz des Kohlenstoff- und Wasserstoff-Gehaltes im Kraftstoff analysiert (siehe Abbildung 6-35).

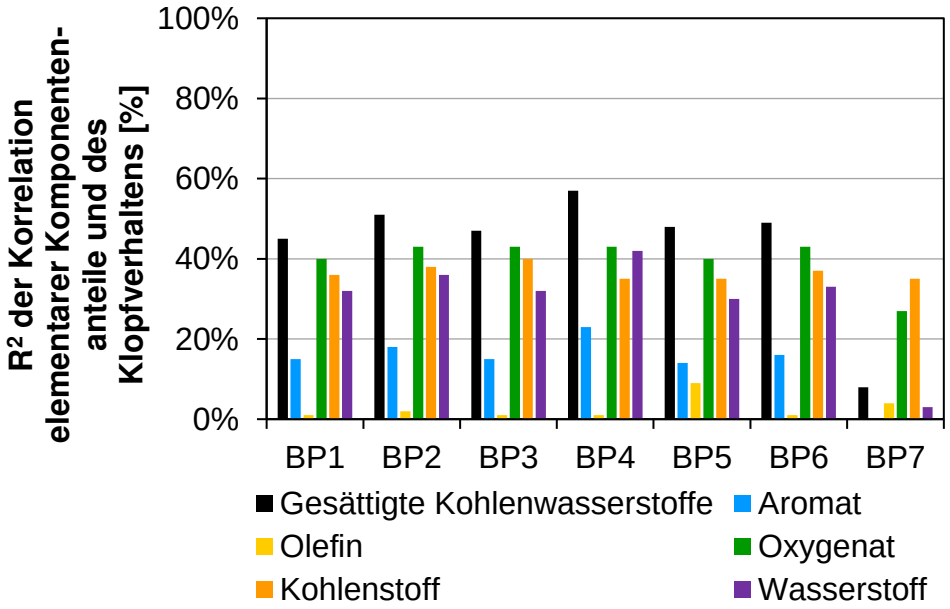


Abbildung 6-35: Resultat der Korrelationsanalyse der Klopfneigung und elementarer Kraftstoffkomponenten. Datenbasis bilden Messungen am Dreizylinder-Serienaggregat. CFD Surrogate sowie KK03 sind in der Analyse nicht berücksichtigt.

Abseits der chemischen Zusammensetzung wurden physikalische Kraftstoffeigenschaften im Zusammenhang mit der Klopfcharakteristik untersucht. Abbildung 6-36 zeigt hierzu einen Ausschnitt der analysierten Parameter.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

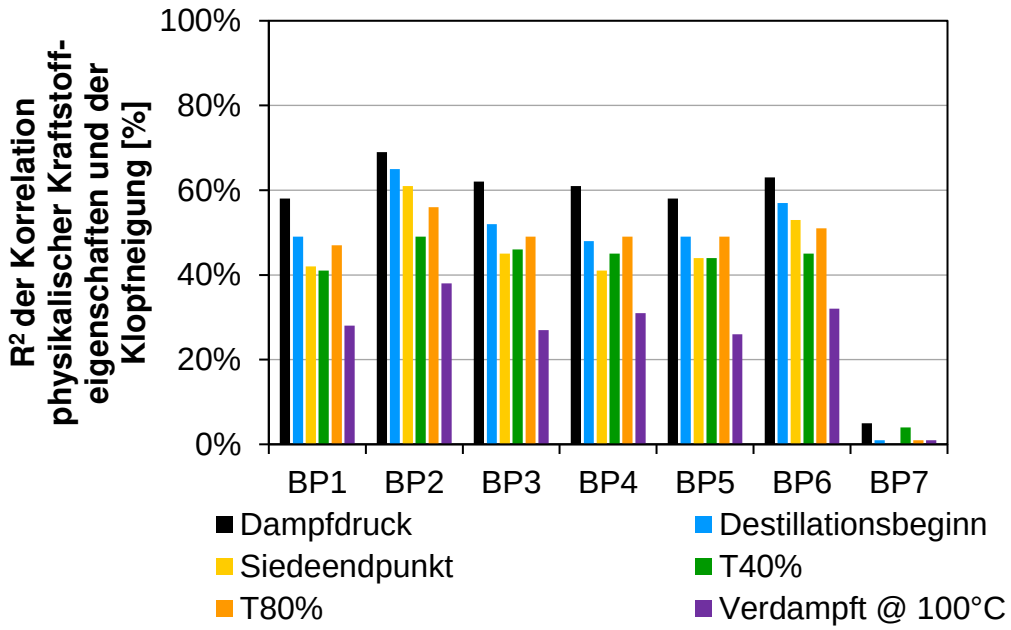


Abbildung 6-36: Resultat der Korrelationsanalyse der Klopfneigung und physikalischer Kraftstoffeigenschaften. Datenbasis bilden Messungen am Dreizylinder-Serienaggregat. CFD Surrogate sowie KK03 und sind in der Analyse nicht berücksichtigt.

Ergebnis dieser Analysen ist, dass sich **weder auf Basis chemischer Parameter noch anhand chemisch-physikalischer Eigenschaften** ein **belastbarer Zusammenhang** zum **kraftstoffspezifischen Klopfverhalten** herstellen lässt. Im Gegensatz zu den Vorentflammungs- bzw. Glühzündungsanalysen dürfte das Verdampfungsverhalten der Kraftstoffe auf die Klopfneigung durchaus einen Einfluss haben, jedoch ist dieser nicht hinreichend hoch, um direkt zur Klopfcharakterisierung herangezogen werden zu können. Es ist nun von Interesse, ob die nach [1], [6] entwickelte DOZ in der Lage ist, die Klopfcharakteristik moderner Motoren abzubilden. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 6-37 die Korrelationsanalyse betreffend die DOZ dargestellt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

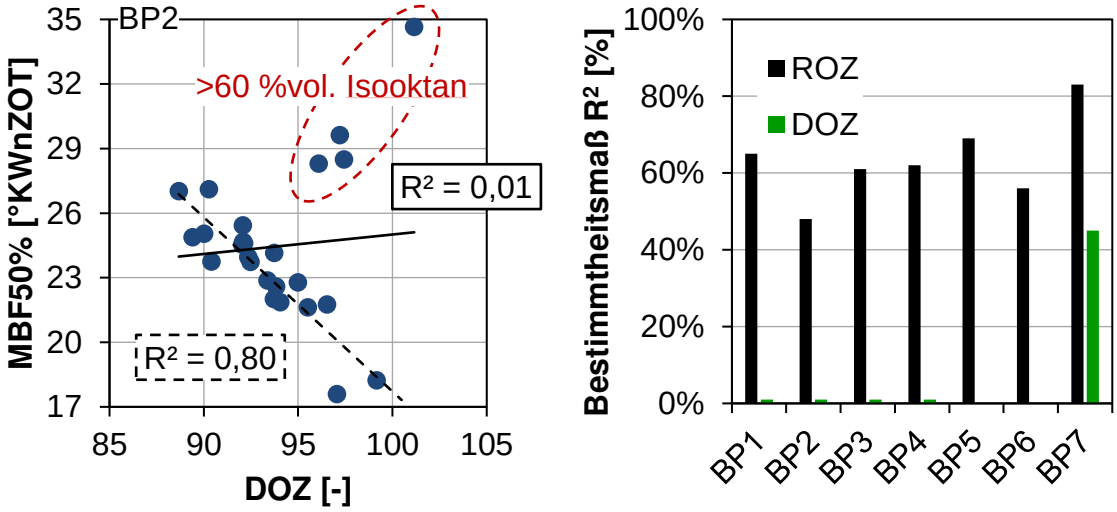


Abbildung 6-37: Potenzialanalyse der DOZ nach [1], [6]. Detailanalyse der Klopfbewertung anhand BP2 (untersucht im Dreizylinder-Serienaggregat). Gestrichelte Regressionsgerade berücksichtigt keine Kraftstoffe > 60 % vol. Isooktan-Anteiles.

Mit Ausnahme von BP7 ist bei den untersuchten Betriebspunkten keine Übertragbarkeit der DOZ auszumachen. BP7 bildet wie bereits zuvor die Ausnahme, da die Betriebsbedingungen den Randbedingungen der CFR-Methodik (DOZ: 149 °C Saugrohrtemperatur) sehr ähnlich sind. Betrachtet man jedoch die Detailanalyse des Betriebspunktes BP2 (Diagramm links), so ist die unzureichende Übertragbarkeit auch bei der DOZ dem Isooktan zuzurechnen. Kraftstoffe, deren Isooktan-Anteil in einem marktrelevanten Bereich liegt, zeigen mit einem Bestimmtheitsmaß R^2 von 80 % ein durchaus zufriedenstellendes Ergebnis. Dieses Verhalten lässt sich auch bei den Betriebspunkten BP1 bzw. BP3 – BP6 beobachten. Es ist anzunehmen, dass analog dem CPI-Verfahren die hohe Ansauglufttemperatur maßgebend für die unzureichende Korrelation von Isooktan ist. Wie bereits in Kapitel 2.4 ausführlich erläutert, besitzt Isooktan ein ausgeprägtes NTK-Verhalten, welches zu einer überaus temperatursensitiven Selbstzündungsneigung führt.

Da es im Interesse der Industrie ist, ein Prüfverfahren zur Verfügung zu haben, welches ausnahmslos alle Kraftstoffe korrekt abbildet, ist eine Modifikation des Verfahrens (gleich dem CPI-Verfahren) notwendig. Dementsprechend wurde auch bei der DOZ-Methodik eine Reduktion der Saugrohrtemperatur auf 30 °C vorgenommen. Abbildung 6-38 zeigt hierzu das Ergebnis der DOZ-Messung unter reduzierter Saugrohrtemperatur (DOZ 30 °C).

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

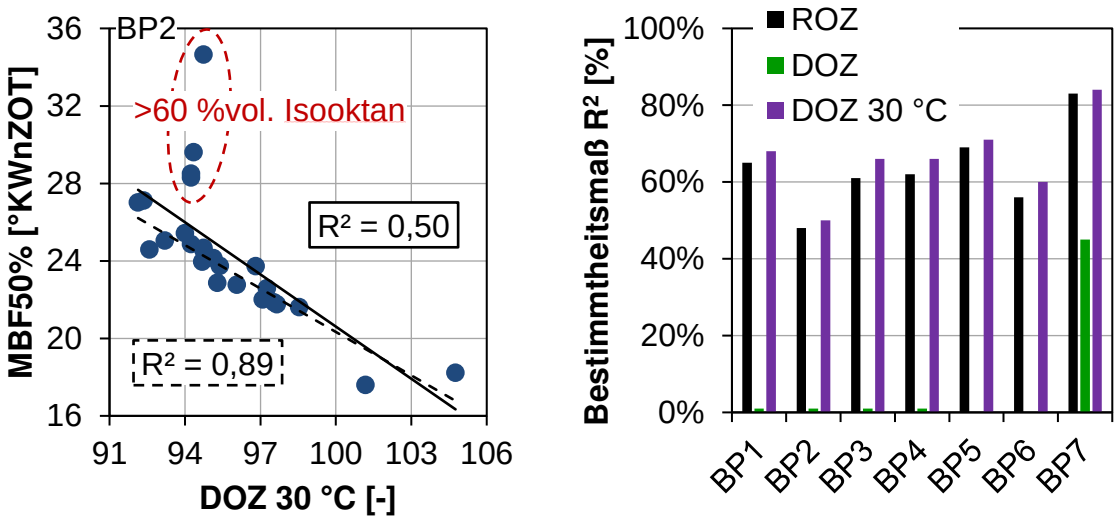


Abbildung 6-38: Potenzialanalyse der DOZ unter reduzierter Saugrohrtemperatur (30 °C). Detailanalyse der Klopfbewertung anhand BP2 (untersucht im Dreizylinder-Serienaggregat). Gestrichelte Regressionsgerade berücksichtigt keine Kraftstoffe > 60 % vol. Isooktan-Anteiles.

Durch die signifikant reduzierte Saugrohrtemperatur (30 °C anstatt 149 °C) kommt es zu einem deutlich verbesserten Bewertungspotenzial der DOZ. Es ist zwar weiterhin ein abweichendes Klopfverhalten der Kraftstoffe hohen Isooktan-Anteiles zu sehen, jedoch ist dieses geringer ausgeprägt. Werden diese Kraftstoffe aus der Korrelation ausgenommen, so resultiert daraus ein Bestimmtheitsmaß R^2 von annähernd 90 %.
Aus den zuvor gezeigten Analysen der physikalischen Parameter (Abbildung 6-36) geht hervor, dass die Kraftstoffverdampfung durchaus einen nennenswerten Zusammenhang zum Klopfverhalten im CFR-Aggregat zu haben scheint. Aus der Analyse des Dampfdruckes bzw. Siedeendes eines jeden untersuchten Kraftstoffes (Abbildung 6-39) ist abzuleiten, dass speziell vier Kraftstoffe (KK02, KK08, KK09 und KK11) ein zu den übrigen Proben abweichendes Verdampfungsverhalten haben. Bei den Kraftstoffen handelt es sich exakt um jene Benzine, deren Isooktan-Anteil > 60 % vol. ist.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

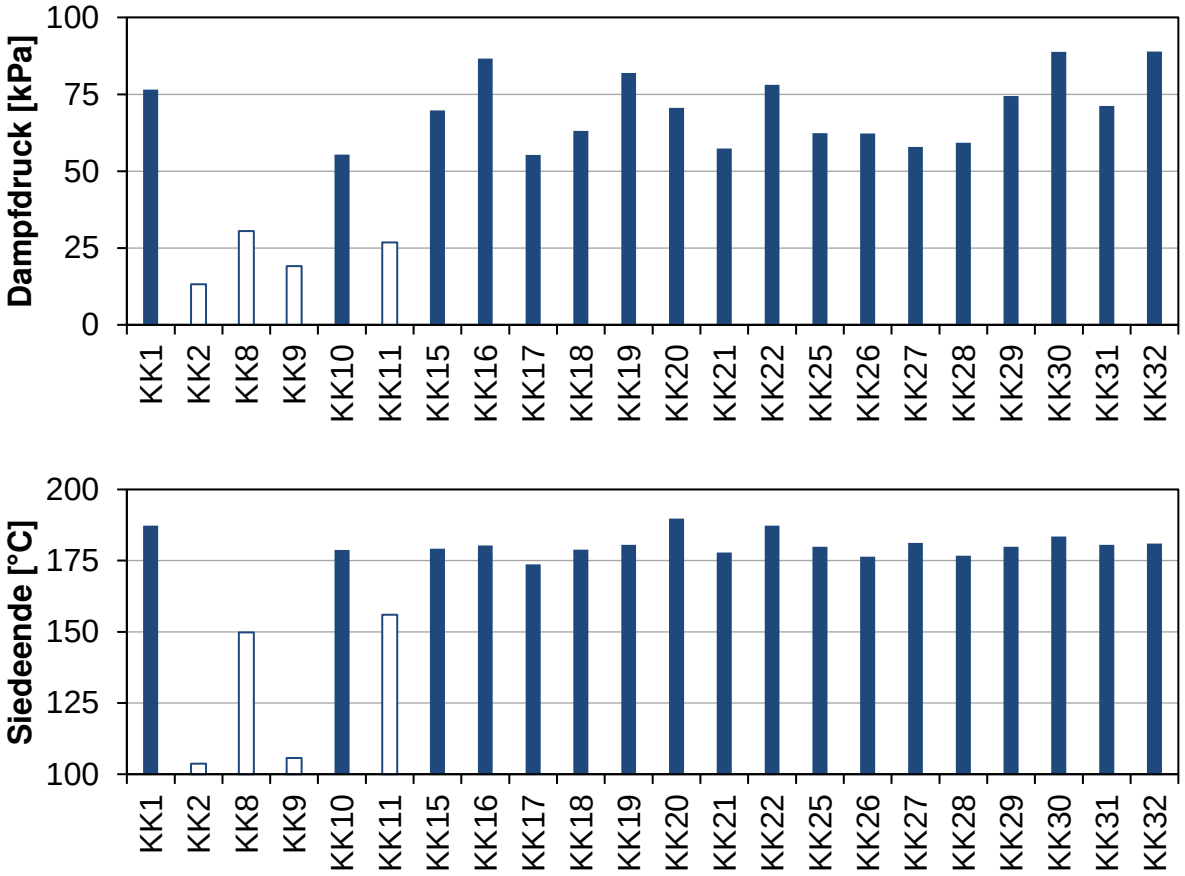


Abbildung 6-39: Verdampfungseigenschaften der untersuchten Kraftstoffe. Proben mit einem Isooktan-Anteil > 60 % vol. (umrandete Balken) zeigen ein deutlich abweichendes Siedeverhalten. Bei KK33 bis KK35 lagen keine Daten vor.

Es ist naheliegend, eine Methodik zu entwickeln, welche die kraftstoffspezifischen Verdampfungseigenschaften berücksichtigt und dementsprechend zu einer Anpassung der DOZ führt. Einen vielversprechenden Ansatz stellt hierbei das statistische Analyseverfahren der multiplen linearen Regression dar. Im Unterschied zur einfachen linearen Regression nach Gleichung 6-1 basiert die multiple lineare Regression auf k (1,…K) unabhängigen Variablen X_k zur Beschreibung der abhängigen Variablen Y. Ohne näher auf die theoretischen Grundlagen dieser Analysemethodik einzugehen stellt sich die Prognose der abhängigen Variablen Y in Gleichung 6-6 wie folgt dar:

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 * x_{i1} + b_2 * x_{i2} + \cdots + b_K * x_{iK}$$ **Gleichung 6-6**

$\hat{y}_i$…Zielgröße (abhängige Variable)

x_{ik}…Einflussgröße (unabhängige Variable)

b_K…geschätzte Regressionsparameter

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Unter Berücksichtigung von Dampfdruck und Siedeende sowie der ermittelten DOZ bei 30 °C kann über den statistischen Ansatz der multiplen linearen Regression das kraftstoffspezifische Klopfverhalten berechnet werden. Die berechnete abhängige Variable $\hat{y}_i$ entspricht hierbei einer berechneten Verbrennungsschwerpunktlage (MBF50%$_{ber.}$) unter Berücksichtigung dreier unabhängiger Variablen (x_1, x_2 und x_3; siehe Gleichung 6-7).

$$\hat{y}_i = MBF50\%_{ber.} = 101{,}79 - 0{,}66 * DOZ\ 30\ °C - 0{,}05 * DD - 0{,}07 * SE$$

Gleichung 6-7

DD…Dampfdruck in kPa
SE…Siedeende in °C

Der aus den unabhängigen Parametern DOZ 30 °C, Dampfdruck (DD) und Siedeende (SE) berechnete Umsatzschwerpunkt MBF50%$_{ber.}$ wird in Abbildung 6-40 dem gemessenen klopfbegrenzten MBF50% gegenübergestellt. Zusätzlich ist der ausschließlich auf Basis der DOZ 30 °C berechnete MBF50%$_{ber.}$ eingezeichnet (entspricht der Korrelation DOZ zu MBF50%), um den Einfluss der Verdampfung darzustellen. Es ist anzumerken, dass die angegebenen Faktoren aus einer Mittelung der Ergebnisse der einzelnen Betriebspunkte hervorgehen und keine motorübergreifende Allgemeingültigkeit besitzen. Es soll anhand dieser Berechnungsmethodik lediglich die Signifikanz der Verdampfung belegt werden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

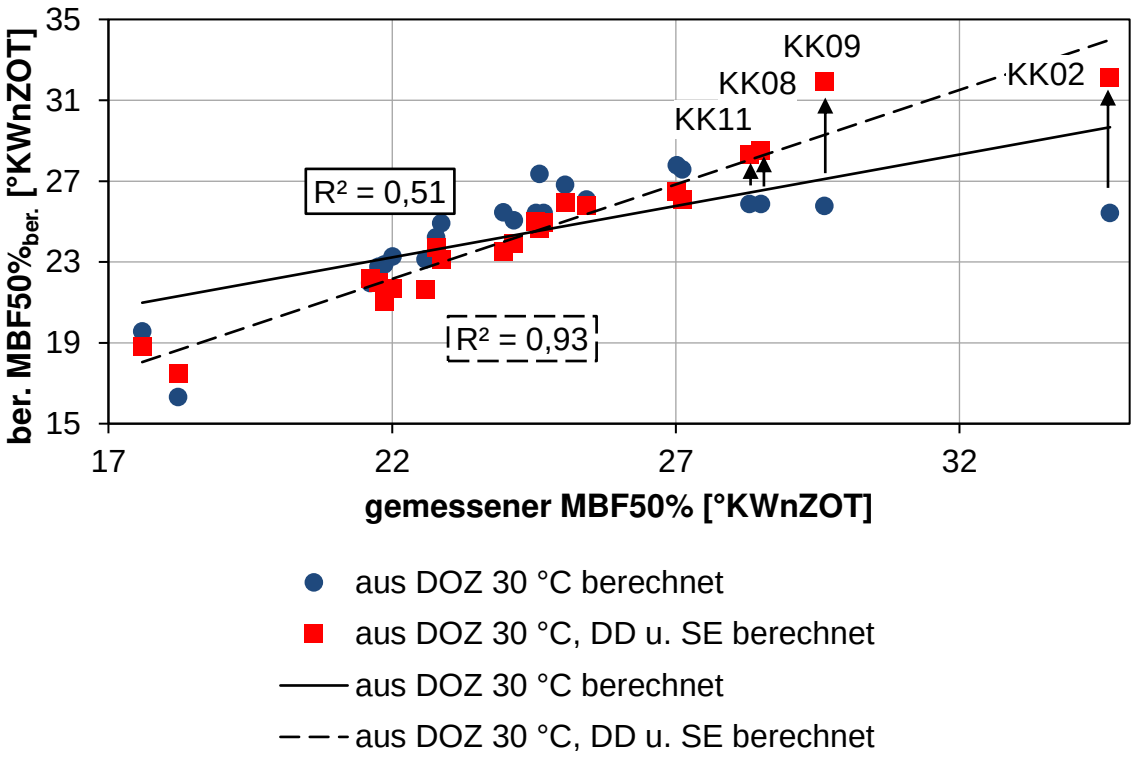


Abbildung 6-40: Korrelation des bei BP2 gemessenen klopfbegrenzten Umsatzschwerpunkts und des auf Basis der DOZ 30 °C bzw. der DOZ 30 °C, dem Siedeende und dem Dampfdruck berechneten Umsatzschwerpunktes ($MBF50\%_{ber.}$).

Unter Berücksichtigung der kraftstoffspezifischen Verdampfungseigenschaften konnte die Übertragbarkeit der DOZ von 50 % auf ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß adj. R^2 von 93 % angehoben werden. Die Adjustierung des Bestimmtheitsmaßes berücksichtigt die zusätzlichen unabhängigen Variablen.

Abschließend wird in Abbildung 6-41 das Bewertungspotenzial der ROZ bzw. DOZ 30 °C unter Berücksichtigung der Kraftstoffverdampfung für alle untersuchten Betriebsbedingungen gegenübergestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass (mit Ausnahme von BP7) eine signifikante Steigerung der Übertragbarkeit gegeben ist. Mit teils über 90 % Korrelationsgüte zeigt die Berechnungsmethodik auf Basis der DOZ 30 °C, dem Dampfdruck und dem Siedeende das beste Ergebnis. Weshalb unter Berücksichtigung der Verdampfungscharakteristik exakt jener Betriebspunkt mit hoher Ansauglufttemperatur nicht mehr korrekt wiedergegeben wird, konnte nicht vollends geklärt werden. Die Vermutung liegt nahe, dass unter den heißen Betriebsbedingungen der Kühleffekt der Kraftstoffverdampfung eine untergeordnete Rolle spielt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

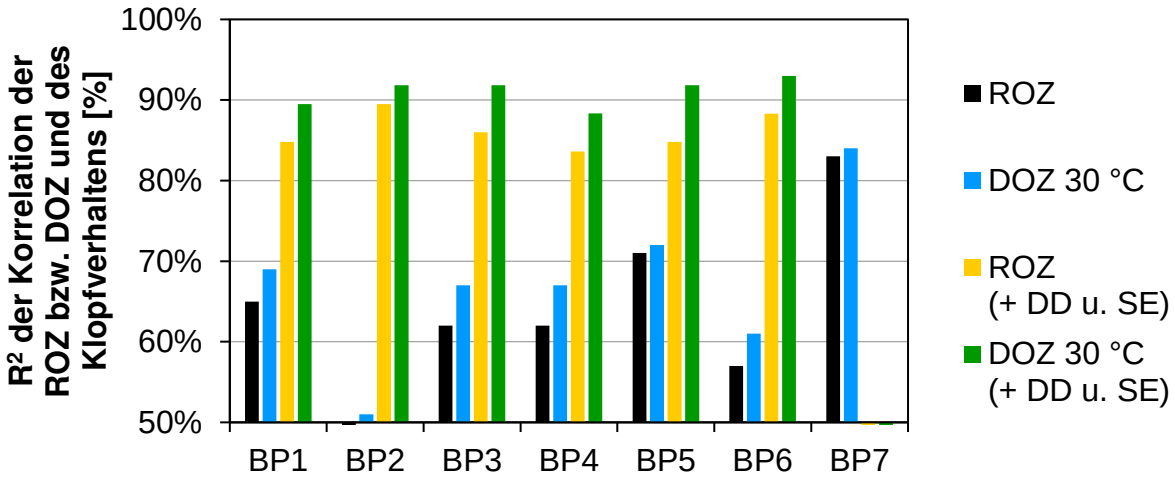


Abbildung 6-41: Vergleich des betriebspunktspezifischen Prognosepotenziales der ROZ und DOZ 30 °C sowie beider Kennzahlen unter Berücksichtigung der Kraftstoffverdampfungseigenschaften.

Detaillierte experimentelle Analysen der DOZ unter erhöhtem Saugrohrdruck (Aufladeeinheit) wurden im Zuge dieser Arbeit nicht durchgeführt.

Zusammenfassung der DOZ-Validierung:

- Die ROZ und MOZ spiegeln das tatsächliche Klopfverhalten der Kraftstoffe in relevanten Betriebspunkten nicht ausreichend genau wider (ROZ-Bestimmtheitsmaß R^2 maximal 69%).
- Moderne Brennraumbedingungen weichen deutlich von den Randbedingungen des ROZ- und MOZ-Verfahrens ab.
- Mit Ausnahme des Betriebspunktes BP7 (120 °C Ladelufttemperatur) lassen alle untersuchten Motorbetriebspunkte einen negativen K-Wert [5] erkennen. Dementsprechend resultiert eine steigende Sensitivität (geringere MOZ) in einer reduzierten Klopfreaktivität im Vollmotor.
- Die Analyse der physikalischen Eigenschaften der Kraftstoffe lässt einen maßgeblichen Einfluss des Verdampfungsverhaltens ableiten.
- Eine Reduktion der Ansauglufttemperatur beim DOZ-Verfahren nach [1], [6] führt zu einer signifikanten Verbesserung der Übertragbarkeit der DOZ auf das Klopfverhalten des modernen Motors.
- Unter Berücksichtigung des Kraftstoffverdampfungsverhaltens kann das Potenzial der DOZ als auch der ROZ deutlich angehoben werden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

7 Zusammenfassung

Infolge der gesteigerten spezifischen Leistung heutiger Motoren sowie moderner Kraftstoffe hohen biogenen Anteiles, kommt es zu neuen entwicklungstechnischen Herausforderungen durch das Auftreten von irregulären Verbrennungsphänomen. Die normgerechten Kraftstoffkennzahlen Research-Oktanzahl (ROZ) und Motor-Oktanzahl (MOZ) lassen in diesem Zusammenhang keine hinreichend genaue Selbstzündungscharakterisierung zu. Neben der unzureichenden Bewertung des Vorentflammungs- und Glühzündungsverhaltens ist im Fall moderner Motoren ebenso die Beurteilung des Klopfverhaltens eingeschränkt. Bereits Kalghatgi (2001) hat in [5] die ROZ und MOZ zur Klopfbewertung aufgrund moderner Betriebsbedingungen als ungeeignet beschrieben.

Mit dem Ziel einer belastbaren Selbstzündungsbewertung (Vorentflammung, Glühzündung, Klopfen) hochalkoholhaltiger Kraftstoffe im direkteinspritzenden ottomotorischen Betrieb hat Martin (2013) [1] neue, auf einem direkteinspritzenden CFR-Motor basierende Prüfmethoden entwickelt. Die sogenannte Compression Pre-Ignition Kennzahl (CPI) dient hierbei der Bewertung des Vorentflammungsverhaltens, wogegen die Hot Spot Pre-Ignition Kennzahl (HSPI) zur Quantifizierung der Glühzündungsneigung herangezogen wird. Die Direkteinspritzende-Oktanzahl (DOZ) beschreibt demgegenüber das konventionelle Kopfverhalten.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung von Prüfmethoden zur Selbstzündungscharakterisierung von Ottokraftstoffen, unabhängig derer Komponentenzusammensetzung. Ausgangsbasis hierzu stellen unter anderem die Kennzahlen CPI, HSPI und DOZ dar. Mit eine Kraftstoffauswahl von über 30 Kraftstoffen wird eine belastbare Validierung der potenziellen Prüfverfahren sichergestellt. Die Kraftstoffe umfassen neben oxygenathaltigen Benzinen (Ethanol, Methanol, Ether) ebenfalls eine Vielzahl an EN 228 konformen Tankstellenkraftstoffen sowie Proben ohne jegliche alkoholische Komponente.

Die in der ersten Projektphase an einem modernen Dreizylinder-Serienaggregat bzw. einem Einzylinder-Forschungsmotor durchgeführte Validierung der potenziellen Kennzahlen (ROZ, MOZ, CPI, HSPI, DOZ) lässt bei keiner der betrachteten Methoden ein hinreichend genaues Ergebnis erkennen. Die Selbstzündungsneigung einzelner Kraftstoffe unterscheidet sich teils erheblich, je nachdem ob diese am CFR-Motor oder am modernen Aggregat untersucht wurden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Umfangreiche Analysen der chemischen bzw. physikalischen Kraftstoffeigenschaften sowie deren Komponentenzusammensetzung lassen ebenfalls keinen unmittelbaren Zusammenhang zum kraftstoffspezifischen Selbstzündungsverhalten im Motor erkennen.

Mithilfe detaillierter reaktionskinetischer Kraftstoffdaten (Zündverzugszeitanalysen) kann die Selbstzündungscharakteristik der einzelnen Proben auf drei wesentliche Temperaturbereiche (Niedertemperatur-, Intermediär- und Hochtemperaturbereich) reduziert werden. Kraftstoffe mit einem ausgeprägten Niedertemperaturkoeffizienten (NTK) zeigen hierbei ein äußerst temperatursensitives Verhalten. So nimmt im Intermediärtemperaturbereich NTK-behafteter Kohlenwasserstoffgemische die Zündverzugszeit, trotz steigender Temperatur, entgegen der grundsätzlichen Annahme, zu. In diesem Zusammenhang ist vor allem bei den Reinstoffen Isooktan und n-Heptan, welche per Definition als Referenzkraftstoffe der ROZ- und MOZ-Bewertung dienen, ein signifikant ausgeprägtes NTK-Verhalten zu beobachten.

Auf Basis thermodynamischer Brennraumanalysen der modernen Versuchsträger und den Erkenntnissen aus den reaktionskinetischen Daten kann jener Temperaturbereich als relevant definiert werden, in welchem das NTK-Verhalten der Kraftstoffe dominant ist. Analysen der In-Zylinder-Bedingungen des CFR-Motors zeigen, dass diese gegenüber modernen Motoren zu deutlich höheren Temperaturen verschoben sind und infolge das kraftstoffspezifische Zündverhalten abweicht.

Mithilfe der Adaption einer externen Aufladeeinheit inklusive Ladeluftkühlung ist es möglich die thermodynamischen Randbedingungen im direkteinspritzenden CFR-Aggregat den Bedingungen im modernen Motor anzupassen. Im Fall der Vorentflammung wurde durch die Optimierung der Betriebsbedingungen (Ansaugluftemperatur: 200 °C auf 30 °; Ladedruck: 1100 mbar abs.) der nach [1] entwickelten **CPI** eine **Genauigkeit R^2** der Vorentflammungsbewertung von **95 % (Einzylinder-Forschungsmotor)** bzw. **87 % (Dreizylinder-Serienaggregat)** erreicht.

Hinsichtlich der Klopfcharakterisierung resultiert die Reduktion der DOZ-Ansaugluftemperatur von 149 °C auf 30 °C in einer gegenüber der ROZ genaueren Klopfbewertung. Unter Berücksichtigung der kraftstoffspezifischen Verdampfungseigenschaften (Dampfdruck und Siedeende) konnte das Potenzial der **DOZ** noch weiter gesteigert werden, sodass in einzelnen Betriebspunkten ein **Bestimmtheitsmaß R^2** von **mehr als 90 %** vorliegt.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Im Zuge dieser Arbeit konnte keine Übertragbarkeit der HSPI-Kennzahl nach [1] zur Beschreibung des Glühzündungsverhaltens nachgewiesen werden. Eine Anpassung der Betriebsrandbedingungen des HSPI-Verfahrens hat ebenso zu keiner Verbesserung geführt. Durch das deutlich ältere Brennverfahren des CFR-Motors gegenüber des zur HSPI-Validierung herangezogenen Einzylinder-Forschungsmotors sowie der geringen CFR-Motordrehzahl (900 U/min gegenüber 1500 U/min) ist abzuleiten, dass die In-Zylinder-Strömungsbedingungen signifikant voneinander abweichen. Auf Basis der Erkenntnisse aus numerischen Strömungssimulationen [7] ist anzunehmen, dass dies maßgeblich zur unzureichenden Übertragbarkeit beiträgt. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf.

Abschließend gibt Tabelle 22 einen Überblick des Komponenteneinflusses auf das Selbstzündungsverhalten (Glühzündung, Vorentflammung, Klopfen) in modernen Aggregaten.

Tabelle 22: Bewertung des Komponenteneinflusses auf die Selbstzündungsneigung (Glühzündung, Gasphasenvorentflammung, Klopfen) der Kraftstoffe im modernen Motor. Ein (+) kennzeichnet einen positiven Effekt auf die Kraftstoffperformance im Motor.

	Komponente	Glühzündung (Einzylinder-Forschungsmotor)	Gasphasenzündung (1- und 3-Zylinder)	Klopfen (Dreizylinder-Forschungsmotor)
Paraffin	Isohexan	-	-	-
	Isooktan	keine Bewertung	+	o
Naphthen	Cyclohexan	-	-	o
Olefin	n-Hexen	-	-	-
Aromat	Toluol	o	+	+
Oxygenat	Ethanol	o*	+	+
	Methanol	o*	+	+
Referenz KK03		+/- gibt Tendenz an		

*negative Charakteristik erst bei höheren Zumischraten

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Ausblick

Hinsichtlich der CPI- und DOZ-Kennzahl sind bereits erste Anstrengungen zur potenziellen Normung dieser Verfahren im Gange.

Betreffend die HSPI-Kennzahl wurde ein weiterführendes FVV-Forschungsprojekt beantragt und bereits genehmigt. Im Zuge dieses Projektes soll in erneuter Zusammenarbeit mit der RWTH Aachen University auf Basis fundamentaler Analysen des Glühzündungsprozesses eine Apparatur zur Glühzündungsbewertung entwickelt werden.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

8 Literaturverzeichnis

[1] C. Martin und R. Luef: *Downsizingkraftstoffe*, Vorhaben Nr. 1078, Frankfurt am Main: FVV, 2013.

[2] S. Pischinger: *Antriebsentwicklung der Zukunft*, ATZextra, Bd. 16, Nr. 6, pp. 136-141, 4/2011.

[3] E. Chapman, R. Davis, W. Studzinski und P. Geng: *Fuel Octane and Volatility Effects on the Stochastic Pre-Ignition Behavior of a 2.0L Gasoline Turbocharged DI Engine*, SAE Technical Paper, 2014, doi: 10.4271/2014-01-1226.

[4] N. Sasaki, K. Nakata, K. Kawatake, S. Sagawa et al.: *The Effect of Fuel Compounds on Pre-ignition under High Temperature and High Pressure Condition*, SAE Technical Paper, 2011, doi: 10.4271/2011-01-1984.

[5] G. T. Kalghatgi: *Fuel Anti-Knock Quality - Part I. Engine Studies*, SAE Technical Paper, 2001, doi: 10.4271/2001-01-3584.

[6] C. Martin: *Irreguläre Verbrennungsphänomene in hochaufgeladenen direkteinspritzenden Ottomotoren mit besonderem Fokus auf der Entwicklung von neuen kraftstoffbeschreibenden Kennzahlen und optischer Diagnostik*, Dissertation, Wien: Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der Technischen Universität Wien, 2015.

[7] J. Dedl und O. Budak: *Kraftstoffkennzahlen Biofuels II*, Vorhaben Nr. 1180, Frankfurt am Main: FVV, 2018.

[8] R. Pischinger, M. Kell und T. Sams: *Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine*, 3. Auflage, Wien: SpringerWienNewYork, 2009, ISBN: 978-3211-99276-0.3.

[9] E. Winkelhofer, A. Hirsch, P. Kapus, M. Kortschak et al.: *TC GDI Engines at Very High Power Density - Irregular Combustion and Thermal Risk*, SAE Technical Paper, 2009, doi: 10.4271/2009-24-0056.

[10] M. Amann, T. Alger und D. Mehta: *The Effect of EGR on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines*, SAE Technical Paper, 2011, doi: 10.4271/2011-01-0339.

[11] A. Zahdeh, P. Rothenberger, W. Nguyen et al.: *Fundamental Approach to Investigate Pre-Ignition in Boosted SI Engines*, SAE Technical Paper, 2011, doi: 10.4271/2011-01-0340.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[12] M. Amann, D. Mehta und T. Alger: *Engine Operating Condition and Gasoline Fuel Composition Effects on Low-Speed Pre-Ignition in High-Performane Spark Ignited Gasoline Engines*, SAE Technical Paper, 2011, doi: 10.4271/2011-01-0342.

[13] T. Inoue, Y. Inoue und M. Ishikawa: *Abnormal Combustion in a Highly Boosted SI Engine - The Occurence of Super Knock*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1141.

[14] K. Takeuchi, K. Fujimoto, S. Hirano und M. Yamashita: *Investigation of Engine Oil Effect on Abnormal Combustion in Turbocharged Direct Injection - Spark Ignition Engines*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1615.

[15] O. Welling, N. Collings, J. Williams und J. Moss: *Impact of Lubricant Composition on Low-speed Pre-Ignition*, SAE Technical Paper, 2014, doi: 10.4271/2014-01-1213.

[16] T. Hülser, G. Grünefeld, T. Brands, M. Günther und S. Pischinger: *Optical Investigation on the Origin of Pre-Ignition in a Highly Boosted SI Engine Using Bio-Fuels*, SAE Technical Paper, 2013, doi:10.4271/2013-01-1636.

[17] J.-M. Zaccardi, M. Lecompte, L. Duval und A. Pagot: *Vorentflammung an hoch aufgeladenen Ottomotoren*, MTZ, Bd. 70, Nr. 12, pp. 938-945, 2009.

[18] J. Willand, M. Daniel, E. Montefrancesco, B. Geringer, P. Hofmann und M. Kieberger: *Grenzen des Downsizing bei Ottomotoren durch Vorentflammung*, MTZ, Bd. 70, Nr. 5, pp. 422-428, 2009.

[19] T. Lauer, M. Heiss, N. Bobicic und S. Pritze: *Modellansatz zur Entstehung von Vorentflammung*, MTZ, Bd. 75, Nr. 1, pp. 64-71, 2014.

[20] M. Mayer: *Einfluss der Motorölspezifikationen sowie unterschiedlicher Kraftstoffeigenschaften auf das Vorentflammungsverhalten von hochaufgeladenen direkteinspritzenden Ottomotoren*, Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der Technischen Universität Wien, 2015.

[21] G. Merker und R. Teichmann: *Grundlagen Verbrennungsmotor*, 7. Auflage, Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014, ISBN: 978-3-658-03194-7.

[22] R. van Basshuysen: *Ottomotor mit Direkteinspritzung und Direkteinblasung*, 4. Auflage, Wiesbaden: Springer Vieweg, 2017, ISBN: 978-3-658-12214-0.

[23] R. van Basshuysen und F. Schäfer: *Handbuch Verbrennungsmotor*, 8. Auflage, Wiesbaden: Springer Vieweg, 2017, ISBN: 978-3-658-10901-1.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

[24] H. Grohe und G. Russ: *Otto- und Dieselmotoren*, 15. Auflage, Würzburg: Vogel, 2010, ISBN: 978-3-8343-3186-1.

[25] R. B. GmbH: *Ottomotor-Management*, 2. Auflage, Wiesbaden: Vieweg, 2003, ISBN: 3-528-13877-7.

[26] R. Stein, M. Foster, T. Whiting, J. Anderson und S. VanderGriend: *Effect of Heat of Vaporization, Chemical Octane, and Sensitivity on Knock Limit for Ethanol - Gasoline Blends*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1277.

[27] G. T. Kalghatgi: *Fuel Anti-Knock Quality - Part II. Vehicle Studies - How Relevant is Motor Octane Number (MON) in Modern Engines?*, SAE Technical Paper, 2001. doi: 10.4271/2001-01-3585.

[28] G. Merker, C. Schwarz, G. Stiesch und F. Otto: *Verbrennungsmotoren, Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung*, 3. Auflage, Wiesbaden: Teubner, 2006, ISBN: 978-3-8351-0080-0.

[29] U. Spicher und M. Rothe: *Extremklopfer*, Vorhaben Nr. 816, Frankfurt am Main: FVV, 2005.

[30] J. B. Heywood: *Internal Combustion Engine Fundamentals*, New York: McGraw-Hill, Inc., 1988, ISBN: 0-07-028637-X.

[31] J. Warnatz, U. Maas und R. W. Dibble: *Verbrennung*, 3. Auflage, Heidelberg: Springer, 2001, ISBN: 3-540-42128-9.

[32] C. Dahnz, K.-M. Han und M. Magar: *Vorentflammung bei Ottomotoren*, Vorhaben Nr. 931, Frankfurt am Main: FVV, 2009.

[33] P. Hofmann, M. Kieberger, B. Geringer und B. Willand: *Auslösemechanismen und Einflussfaktoren auf Vorentflammungsphänomene an hoch aufgeladenen Ottomotoren*, 17. Aachener Kolloquium Fahrzeug- und Motorentechnik, Aachen, 2008.

[34] Z. Wang, H. Liu, T. Song, Y. Xu und J. Wang: *Investigation on Pre-Ignition and Super-Knock in Highly Boosted Gasoline Direct Injection Engines*, SAE Technical Paper, 2014, doi: 10.4271/2014-01-1212.

[35] P. Manz, M. Daniel, K. Jippa und J. Willand: *Vorentflammung bei hoch aufgeladenen Turbomotoren, Analyseverfahren und Ergebnisse*, 8. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, Baden-Baden, 2008.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[36] E. Schünemann, A. Witt, M. Selder und C. Schwarz: *Pre-Ignition Analysis on a Turbocharged Gasoline Engine with Direct Injection*, 4. Tagung ottomotorisches Klopfen, Berlin, 2013.

[37] S. Palaveev: *Vorentflammung bei Ottomotoren II*, Vorhaben Nr. 1051, Frankfurt am Main: FVV, 2013.

[38] S. Palaveev, M. Magar, H. Kubach, R. Schiessl et al.: *Premature Flame Initiation in a Turbocharged DISI Engine - Numerical and Experimental Investigations*, SAE Technical Paper, 2013, doi: 10.4271/2013-01-0252.

[39] Y. Long, Z. Wang, Q. Yunliang, X. Shouzhi et al.: *Effect of Oil and Gasoline Properties on Pre-Ignition and Super-Knock in a Thermal Research Engine (TRE) and an Optical Rapid Compression Machine (RCM)*, SAE Technical Paper, 2016, doi: 10.4271/2016-01-0720.

[40] K. Morikawa, Y. Moriyoshi, T. Kuboyama, Y. Imai et al.: *Investigation and Improvement of LSPI Phenomena and Study of Combustion Strategy in Highly Boosted SI Combustion in Low Speed Range*, SAE Technical Paper, 2015, doi: 10.4271/2015-01-0756.

[41] Y. Qi, Y. Xu, Z. Wang und J. Wang: *The Effect of Oil Intrusion on Super Knock in Gasoline Engine*, SAE Technical Paper, 2014, doi: 10.4271/2014-01-1224.

[42] M. Amann, T. Alger, B. Westmoreland und A. Rothmaier: *The Effects of Piston Crevices and Injection Strategy on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1148.

[43] A. Gupta, H. Shao, J. Remias, J. Roos et al.: *Relative Impact of Chemical and Physical Properties of the Oil-Fuel Droplet on Pre-Ignition and Super-Knock in Turbocharged Gasoline Engines*, SAE Technical Paper, 2016, doi: 10.4271/2016-01-2278.

[44] R. Ernst, S. Münzinger, B. Hanula, T. Schnitzler und F. Geiser: *Das Phänomen Glühzündung Ursachen, Entstehung und Vermeidung*, MTZ, Bd. 63, Nr. 11, pp. 916-924, 2002.

[45] M. Günther: *Vorentflammung und Glühzündungen von Ottokraftstoffen mit Bioanteilen*, Dissertation, Aachen: Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University, 2015.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[46] N. Sasaki und K. Nakata: *Effect of Fuel Components on Engine Abnormal Combustion*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1276.

[47] X. Yu, V. Costanzo, E. Chapman und R. Davis: *A Robust Preignition Rating Methodology: Evaluating the Prospensity to Establish Propagating Flames under Real Engine Conditions*, SAE Technical Paper, 2017, doi: 10.4271/2017-01-2241.

[48] R. D. Reitz und R. Diwakar: *Structure of High-Pressure Fuel Sprays*, SAE Technical Paper, 1987, doi: 10.4271/870598.

[49] Richtlinie 2009/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. April 2009 zur Änderung der Richtline 98/70/EG sowie zur Änderung der Richtlinie 1999/32/EG des Rates und zur Aufhebung der Richtlinie 93/12/EWG.

[50] H. Eichlseder, M. Klüting und W. F. Piock: *Grundlagen und Technologien des Ottomotors*, Wien: SpringerWienNewYork, 2008, ISBN 978-3-211-25774-6.

[51] K. Peter und C. Vollhardt: *Organische Chemie*, 4. Auflage, Weinheim: WILEY-VCH, 2005, ISBN: 978-3-527-31380-8.

[52] J. C. R. Assis, J. S. R. Teixeira, L. A. M. Pontes, P. R. B. Guimaraes et al.: *Using the Doehlert matrix as a tool for studying the influence of gasoline components on octane numbers*, Fuel, Bd. 113, Nr. 11, pp. 744-749, 2013.

[53] K. Nakata, D. Uchida, A. Ota, S. Utsumi und K. Kawatake: *The Impact of RON on SI Engine Thermal Efficiency*, SAE Technical Paper, 2007, doi: 10.4271/2007-01-2007.

[54] R. A. Stein, C. J. House und T. G. Leone: *Optimal Use of E85 in a Turbocharged Direct Injection Engine*, SAE Technical Paper, 2009, doi: 10.4271/2009-01-1490.

[55] J. Milpied, N. Jeuland, G. Plassat, S. Guichaous et al.: *Impact of Fuel Properties on the Performances and Knock Behaviour of a Downsized Turbocharged DI SI Engine*, SAE Technical Paper, 2009, doi: 10.4271/2009-01-0324.

[56] W. Lovell: *Knocking Characteristics of Hydrocarbons*, Ind. Eng. Chem., pp. 2388-2438, 1948, doi: 10.1021/ie50468a033.

[57] Richtlinie 98/70/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 13. Oktober 1998 über die Qualität von Otto- und Dieselkraftstoffen und zur Änderung der Richtlinie 93/12/EWG des Rates.

[58] DIN EN 228:2017-08: Kraftstoffe - Unverbleite Ottokraftstoffe - Anforderungen und Prüfverfahren.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

[59] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz und C. K. Westbrook: *A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation*, Combustion and Flame, 7/1998, Nr. 114, pp. 149-177.

[60] H. Nakamura, D. Darcy, M. Mehl, C. J. Tobin et al.: *An experimental and modeling study of shock tube and rapid compression machine ignition of n-butylbenzene/air mixtures*, Combustion and Flame, 1/2014, Bd. 161, Nr. 1, pp. 49-64.

[61] T. Tsujimura, W. J. Pitz, F. Gillespie, H. J. Curran et al.: *Development of Isopentanol Reaction Mechanism Reproducing Autoignition Character at High and Low Temperatures*, Energy & Fuels, 2012, Nr. 26, pp. 4871-4886, doi: 10.1021/ef300879k.

[62] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz et al.: *Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20*, Combustion and Flame, 12/2011, Bd. 12, Nr. 158, pp. 2338-2357.

[63] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz und C. K. Westbrook: *A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation*, Combustion and Flame, Bd. 3, Nr. 129, pp. 253-280, 05/2002.

[64] K. A. Heufer, S. M. Sarathy, H. J. Curran, A. C. Davis et al.: *Detailed Kinetic Modeling Study of n-Pentanol Oxidation,* Energy & Fuel, Bd. 11, Nr. 26, pp. 6678-6685, 11/2012, doi: 10.1021/ef3012596.

[65] C. K. Westbrook: *Chemical kinetics of hydrocarbon ignition in practical combustion systems*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 2, Nr. 28, pp. 1563-1577, 2000.

[66] S. M. Sarathy, S. Vranchx, K. Yasunaga, M. Mehl et al.: *A comprehensive chemical kinetic combustion model for the four butanol isomers*, Combustion and Flame, Bd. 6, Nr. 159, pp. 2028-2055, 6/2012.

[67] A. Yates, A. Bell und A. Swarts: *Insights relating to the autoignition characteristics of alcohol fuels*, Fuel, Bd. 1, Nr. 89, pp. 83-93, 1/2010.

[68] N. Atef, G. Kukkadapu, S. Y. Mohamed, M. Al Rashidi et al.: *A comprehensive iso-octane combustion model with improved thermochemistry and chemical kinetics*, Combustion and Flame, Nr. 178, pp. 111-134, 4/2017.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[69] C. Banyon, K. Zhang und H. J. Curran: *An experimental investigation of the effect of alkane fuel structure on reactivity demonstrated through the hexane isomers*, Proceedings of the European Combustion Meeting, pp. 1-41, 2015.

[70] S. Gersen, A. V. Mokhov, J. H. Darmeveil und H. B. Levinsky: *Ignition properties of n-butane and iso-butane in a rapid compression machine*, Combustion an Flame, Bd. 2, Nr. 157, pp. 240-245, 2/2010.

[71] G. Vanhove, M. Ribaucour und R. Minetti: *On the influence of the position of the double bond on the low-temperature chemistry of hexenes*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 1, Nr. 30, pp. 1065-1072, 1/2005.

[72] M. Yahyaoui, N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C.-E. Paillard et al.: *Kinetics of 1-hexene oxidation in a JSR and a shock tube: Experimental and modeling study*, Combustion and Flame, Nr. 147, pp. 67-78, 10/2006.

[73] A. J. Dean, O. G. Penyazkov, K. L. Sevruk und B. Varatharajan: *Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures*, Proceedings of the Combustion Intitute, Bd. 2, Nr. 31, pp. 2481-2488, 1/2007.

[74] O. Lemaire, M. Ribaucour, M. Carlier und R. Minetti: *The production of benzene in the low-temperature oxidation of cyclohexane, cyclohexene, and cyclohexa-1,3-diene*, Combustion and Flame, Nr. 127, pp. 1971-1980, 10/2001.

[75] M. Hartmann, I. Gushterova, M. Fikri, C. Schulz et al.: *Auto-ignition of toluene-doped n-heptane and iso-octane/air mixtures: High-pressure shock-tube experiments and kinetics modeling*, Combustion and Flame, Bd. 1, Nr. 158, pp. 172-178, 1/2011.

[76] K. A. Heufer, J. Bugler und H. J. Curran: *A comparison of longer alkane and alcohol ignition including new experimental results for n-pentanol and n-hexanol*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 1, Nr. 34, pp. 511-518, 2013.

[77] P. Hellier, M. Talibi, A. Eveleigh und N. Ladommatos: *An overview of the effects of fuel molecular structure on the combustion and emissions characteristics of compression ignition engines*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, Bd. 1, Nr. 232, pp. 90-105, 2017, doi: 10.1177/0954407016687453.

[78] A. Schönborn, N. Ladommatos, J. Williams, R. Allan und J. Rogerson: *The influence of molecular structure of fatty acid monoalkyl esters on diesel combustion*, Combustion and Flame, Bd. 7, Nr. 156, pp. 1396-1412, 7/2009.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

[79] E. Koivisto, N. Ladommatos und M. Gold: *Systematic study of the effect of the hydroxy functional group in alcohol molecules on compression ignition and exhaust gas emissions*, Fuel, Nr. 153, pp. 650-663, 8/2015.

[80] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, K. Yasunaga et al.: *Autoignition behavior of unsaturated hydrocarbons in the low and high temperature regions*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 1, Nr. 33, pp. 201-208, 2011.

[81] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan, M. Payne und J. Rogerson: *The Impact of Saturated and Unsaturated Fuel Molecules on Diesel Combustion and Exhaust Emissions*, SAE Technical Paper, 2011, doi: 10.4271/2011-01-1922.

[82] Y. Zhang und A. L. Boehman: *Experimental study of the autoignition of C8H16O2 ethyl and methyl esters in a motored engine*, Cumbustion and Flame, Bd. 3, Nr. 157, pp. 546-555, 3/2010.

[83] A. Schönborn, N. Ladommatos und C. Bae: *Diffusion- and Homogeneous-Charge Combustion of Volatile Ethers in a Compression Ignition Engine*, Energy & Fuels, Bd. 23, pp. 5865-5878, 2009, doi: 10.1021/ef900697r.

[84] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan und J. Rogerson: *Influence of Carbonate Ester Molecular Structure on Compression Ignition Combustion and Emissions*, Energy & Fuels, Bd. 27, pp. 5222-5245, 2013, doi: 10.1021/ef401415j.

[85] A. Fridlyand, S. S. Goldsborough, K. Brezinsky, S. S. Merchant und W. H. Green: *Influence of the double bond position on the oxidation of decene isomers at high pressures and temperatures*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 1, Nr. 35, pp. 333-340, 2015.

[86] S. Tanaka, F. Ayala, J. C. Keck und J. B. Heywood: *Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives*, Combustion and Flame, Nr. 132, pp. 219-239, 1/2003, doi: 10.1016/S0010-2180(02)00457-1.

[87] M. Mehl, G. Vanhove, W. J. Pitz und E. Ranzi: *Oxidation and combustion of the n-hexene isomers: A wide range kinetic modeling study*, Combustion and Flame, Bd. 4, Nr. 155, pp. 756-772, 12/2008, doi: 10.1016/j.combustflame.2008.07.004.

[88] M. J. Pilling: *Low-Temperature Combustion and Autoignition*, Amsterdam, 1997.

[89] G. Vanhove, G. Petit und R. Minetti: *Experimental study of the kinetic interactions in the low-temperature autoignition of hydrocarbin binary mixtures and a surrogate*

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

fuel, Combustion and Flame, Bd. 3, Nr. 145, pp. 521-532, 5/2006; doi: 10.1016/j.combustflame.2006.01.001.

[90] J. Andrae, D. Johansson, P. Björnborn, P. Risberg und G. Kalghatgi: *Co-oxidation in the auto-ignition of primary reference fuels and n-heptane/toluene blends*, Combustion and Flame, Bd. 4, Nr. 140, pp. 267-286, 3/2005, doi:.

[91] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan und J. Rogerson: *Combustion and emissions characteristics of toluene/n-heptane and 1-octene/n-octane binary mixtures in a direct injection compression ignition engine*, Combustion and Flame, Bd. 10, Nr. 160, pp. 2141-2158, 10/2013, doi: 10.1016/j.combustflame.2013.04.016.

[92] Z. Xiao, N. Ladommatos und H. Zhao: *The effect of aromatic hydrocarbons and oxygenates on diesel engine emissions*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, Bd. 3, Nr. 214, pp. 307-332, 2000, doi: 0.1243/0954407001527448.

[93] D. F. Davidson, B. M. Gauthier und R. K. Hanson: *Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 1, Nr. 30, pp. 1175-1182, 1/2005, doi: 10.1016/j.proci.2004.08.004.

[94] I. Baxter und B. Yeo: *The Waukesha CFR Fuel Research Engine - An International Historic mechanical Landmark*, Waukesha Dresser Bulletin No. 1163, 1980.

[95] ASTM: *Manual for Rating Motor, Diesel and Aviation Fuels, American Society of Testing Materials*, Third Edition 1973-1974, 79-15134.

[96] M. Marzano und P. Nuccio: *Experimental Analysis of the Combustion Process of Commercial and Reference Fuels on the CFR Laboratory Engine*, SAE Technical Paper, 2010, doi: 10.4271/2010-01-2265.

[97] ASTM D2699: *12 Standard Test Method for Research Octane Number of Spark Ignition Engine Fuel*, Designation 237/87.

[98] ASTM D2700: *12 Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark Ignition Engine Fuel*, Designation 236/87.

[99] DIN EN ISO 5163:2014-10: *Mineralölerzeugnisse - Bestimmung der Klopffestigkeit von Otto- und Flugkraftstoffen - Motor-Verfahren*, 2014.

[100] DIN EN ISO 5164:2014-10: *Mineralölerzeugnisse - Bestimmung der Klopffestigkeit von Ottokraftstoffen - Research Verfahren*, 2014.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

[101] W. R. Leppard: *The Chemical Origin of Fuel Octane Sensitivity*, SAE Technical Paper, 1990, doi: 10.4271/902137.

[102] M. Krieck, M. Günther, S. Pischinger, U. Kramer et al.: *Effects of LPG Fuel Formulations on Knock and Pre-Ignition Behavior of a DI SI Engine*, SAE Technical Paper, 2015, doi: 10.4271/2015-01-1947.

[103] G. Kalghatgi, R. Per und H.-E. Angstrom: *A Mehod of Defining Ignition Quality of Fuels in HCCI Engines*, SAE Technical Paper, 2003, doi: 10.4271/2003-01-1816.

[104] P. Risberg, G. Kalghatgi und H.-E. Angstrom: *Auto-ignition Quality of Gasoline-Like Fuels in HCCI Engines*, SAE Technical Paper, 2003, doi: 10.4271/2003-01-3215.

[105] G. Kalghatgi und R. A. Head: *The Available and Required Autoignition Quality of Gasoline - Like Fuels in HCCI Engines at High Temperatures*, SAE Technical Paper, 2004, doi: 10.4271/2004-01-1969.

[106] D. Bradley, C. Morley und H. L. Walmsley: *Relevance of Reseach and Motor Octane Numbers to the Prediction of Engine Autoignition*, SAE Technical Paper, 2004, doi: 10.4271/2004-01-1970.

[107] P. Risberg, G. Kalghatgi und H.-E. Angstrom: *The Influence of EGR on Auto-ignition Quality of Gasoline-like Fuels in HCCI Engines*, SAE Technical Paper, 2004, doi: 10.4271/2004-01-2952.

[108] G. Kalghatgi: *Auto-Ignition Quality of Practical Fuels and Implications for Fuel Requirements of Future SI and HCCI Engines*, SAE Technical Paper, 2005, doi: 10.4271/2005-01-0239.

[109] G. Kalghatgi, K. Nakata und K. Mogi: *Octane Appetite Studies in Direct Injection Spark Ignition (DISI) Engines*, SAE Technical Paper, 2005, doi: 10.4271/2005-01-0244.

[110] S. Remmert, S. Campbell, R. Cracknell, A. Schuetze et al.: *Octance Appetite: The Relevance of a Lower Limit to the MON Specification in a Downsized, Highly Boosted DISI Engine*, SAE Technical Paper, 2014, doi: 10.4271/2014-01-2718.

[111] C. N. Orlebar, A. Joedicke und W. Studzinski: *The Effects of Octane, Sensitivity and K on the Performance and Fuel Economy of a Direct Injection Spark Ignition Vehicle*, SAE Technical Paper, 2014. doi: 10.4271/2014-01-1216.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

[112] V. Mittal und J. Heywood: *The Relevance of Fuel RON and MON to Knock Onset in Modern SI Engines*, SAE Technical Paper, 2008, doi: 10.4271/2008-01-2414.

[113] V. Mittal, J. B. Heywood und W. H. Green: *The Underlying Physics and Chemistry behind Fuel Sensitivity*, SAE Technical Paper, 2010, doi: 10.4271/2010-01-0617.

[114] R. Cracknell, W. Warnecke, J.-H. Redmann und T. K. Goh: *Oktanbedarf bei modernen aufgeladenen Ottomotoren*, MTZ, Bd. 76, Nr. 7-8, pp. 16-21, 2015.

[115] V. Mittal und J. B. Heywood: *The Shift in Relevance of Fuel RON and MON to Knock Onset in Modern SI Engines Over the Last 70 Years*, SAE Technical Paper, 2009, doi: 10.4271/2009-01-2622.

[116] J. E. Anderson, T. G. Leone, M. H. Shelby, T. J. Wallington et al.: *Octane Numbers of Ethanol-Gasoline Blends: Measurements and Novel Estimation Method from Molar Composition*, SAE Technical Paper, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1274.

[117] J. E. Anderson, U. Kramer, S. A. Mueller und T. J. Wallington: *Octane Numbers of Ethanol- and Methanol-Gasoline Blends Estimated from Molar Concentrations*, Energy & Fuels, Bd. 24, pp. 6576-6585, 2010, doi: 10.1021/ef101125c.

[118] Verein Deutscher Ingenieure VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC): *VDI-Wärmeatlas*, Karlsruhe, Düsseldorf: 10. Auflage, Springer, 2005.

[119] DIN 51756-7:1986-02: *Prüfung von Ottokraftstoffen; Bestimmung der Klopffestigkeit (Octanzahl) von Alkoholen und Alkoholmischkraftstoffen im CFR-Prüfmotor*, 1986.

[120] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook und H. J. Curran: *Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions*, Proceedings of the Combustion Institute, Bd. 33, Nr. 1, pp. 193-200, 2011; doi: 10.1016/j.proci.2010.05.027.

[121] I. Frost: *Einfache lineare Regression, Wiesbaden*: SpringerVS, 2018, ISBN: 978-3-658-19731-5.

[122] O. Budak: *Experimentelle und numerische Untersuchungen zur oberflächeninduzierten Vorentflammung im Ottomotor*, Aachen: Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (VKA), 2019.

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.
TU Bibliothek Your knowledge hub WIEN

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar.
The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.